

Universidade Federal do Paraná
Curso de Pós-graduação em Física
Dissertação de Mestrado

Adam Luiz de Azevedo

O Problema de Quebra de Ergodicidade em um
Sistema de 2 Partículas Confinadas e Interagentes

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: *Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz*

Curitiba - PR

2015

A994p

Azevedo, Adam Luiz de

O problema de quebra de ergodicidade em um sistema de 2 partículas confinadas e interagentes/ Adam Luiz de Azevedo. – Curitiba, 2015.

148 f. : il. color. ; 30 cm.

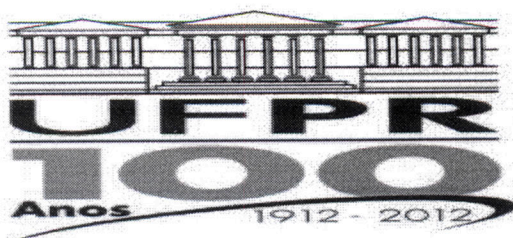
Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-graduação em Física, 2015.

Orientador: Marcos Gomes Eleutério da Luz .

Bibliografia: p. 143-148.

1. Dinâmica da partícula. 2. Teoria ergódica. 3. Colisões (Física nuclear).
I. Universidade Federal do Paraná. II. Luz, Marcos Gomes Eleutério da. III.
Título.

CDD: 530.416



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418
E-mail: posgrad@fisica.ufpr.br

ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

O Problema de Quebra de Ergodicidade em um Sistema de 2 Partículas Confinadas e Interagentes.

ALUNO

ADAM LUIZ DE AZEVEDO

Em sessão pública iniciada às treze horas e trinta minutos do dia 30 de outubro de 2015, após um seminário sob o título acima e posterior arguição, esta banca examinadora decidiu aprovar o candidato com o conceito global A.

Banca Examinadora

Assinatura

Conceito

Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério
da Luz (UFPR)

A

Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana
(UFPR)

A

Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi
(UEPG)

A

Dedico este trabalho aos meus pais, Luiz Danilo de Azevedo e Maria de Lourdes Baggio de Azevedo, à minha companheira Luciane Canestraro pela sua compreensão e apoio e ao meu caríssimo amigo Jefferson Stafusa Elias Portela.

Agradecimentos

- Ao meu amigo Jefferson Stafusa Elias Portela pela ajuda imprescindível com a elaboração dos algoritmos, e dúvidas afins, nos momentos críticos na época da nossa graduação e no decorrer da elaboração deste trabalho;
- Ao Prof. Dr. Adonai S. Sant'Anna pelas suas aulas de Cálculo Diferencial e Integral A (1999) e pelo incentivo para a minha continuidade na carreira acadêmica;
- Ao meu orientador Prof. Dr. Marcos Gomes E. da Luz pela incansável insistência para meu retorno à Física e confiança depositada em minha capacidade de trabalho;
- Ao Prof. Dr. Marcus Werner Beims pela colaboração no cálculo dos Expoentes de Lyapunov;
- À Marina Wosniack pela sua prontidão em me ajudar em dicas computacionais;
- Ao Fabiano M. Andrade e colaboradores pelo projeto FISUX;
- Aos professores do Programa da Pós-Graduação em Física;
- Aos meus amigos pós-graduandos em Física pelo companherismo na realização das disciplinas;
- Ao Prof. Carlos Alberto Martins de Carvalho pelo apoio computacional;
- À CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

O sistema de 2 partículas confinadas em um poço de potencial infinito em uma dimensão é um sistema dinâmico muito simples. Contudo, ele apresenta uma dinâmica rica conforme a razão das massas entre as partículas. O sistema equivale a um bilhar triângulo retângulo com uma única partícula movendo-se a velocidade constante em seu interior e refletindo-se especularmente nas paredes. As sucessivas colisões geradoras de novos valores de momentos lineares das partículas correspondem às reflexões e rotações por um certo ângulo em uma circunferência unitária no plano complexo- z . Este ângulo θ é função da razão das massas entre as partículas. Se θ/π for racional, o sistema não é ergódico. Por outro lado, em princípio, o oposto deveria ser verdadeiro para θ/π irracional, para o qual a dinâmica geraria um comportamento ergódico no espaço de velocidades. No entanto, na literatura há vários resultados numéricos que indicam um comportamento não ergódico. No presente trabalho, pela primeira vez, se estudou detalhadamente a dinâmica de trajetórias de colisões do sistema. A partir disso, conseguimos identificar explicitamente os mecanismos responsáveis pela lentidão na geração de novos momentos em termos de muitas colisões no sistema. De fato, mostramos que a geração de momentos diferentes é muito mais lenta do que pensávamos, de maneira que os resultados numéricos são inconclusivos. Formalmente, nossos resultados não são definitivos para se provar ou não a existência de ergodicidade neste sistema particular. De qualquer forma, esperamos indicar a metodologia correta necessária para se alcançar este intuito no futuro.

Palavras-chave: Duas partículas, Ergodicidade, Bilhar.

Abstract

Two point particles confined in an infinite square well in one-dimensional is a very simple dynamical system. Nevertheless, it presents a rich dynamics depending on the ratio between the particles masses. This system is equivalent to a rectangular triangle billiard in which an unique particle moves freely in the inner region, bouncing specularly from the triangle boundaries. The successive collisions generating new values for the linear momenta of the particles can be viewed as rotations (by angle θ) and reflections along the unitary circle in the z -complex plane. This θ angle is function of the particles masses ratio. If θ/π is a rational number, the system cannot be ergodic. On the other hand, in principle the opposite should hold true for such ratio being irrational, with the dynamics generating an ergodic behavior in the velocities space. Many numerical results in the literature point to a non-ergodic behavior instead. In the present work, for the first time the detailed dynamics of the system collisional trajectories is studied. From them, we are able to identify the specific mechanisms responsible for the observed very slow generation of new momenta in terms of the many collisions taking place in the system. In fact, we show that the generation of distinct momenta is much slower than previously thought, so the existing numerical results are inconclusive. Formally, our results are not definitive to prove or not the existence of ergodicity in this particular system. Nevertheless, we hope it points to the correct methodology necessary to do so in the future.

Keywords: Two particles, Ergodicity, Billiard.

Sumário

Agradecimentos	3
Resumo	4
Abstract	5
Sumário	6
1 Introdução	10
2 Aspectos Gerais sobre Dinâmica em Mecânica Clássica	15
2.1 Um Panorama sobre os Formalismos Analíticos da Mecânica Clássica . . .	15
2.2 Integrabilidade	19
2.3 Sistemas Dinâmicos	22
2.4 Ergodicidade	25
2.5 Bilhares	31
3 O Sistema de Interesse e Resultados Numéricos Preliminares	35
3.1 Sistema de 2 Partículas em um Intervalo Finito	35
3.2 Considerações Preliminares	41
3.3 Colisões Consecutivas	46
4 Estudo Analítico das Classes de Trajetórias nos Processos de Colisão	56

4.1	Colisões Consecutivas Paralelas (CCP)	56
4.1.1	Caso $\gamma > 1$	57
4.1.2	Caso $\gamma < 1$	60
4.2	Colisões Consecutivas Antiparalelas Incompletas (CCAPI)	61
4.2.1	Caso $\gamma > 1$	62
4.2.2	Caso $\gamma < 1$	64
4.3	Relação entre CCP e CCAPI	67
4.4	Colisões Consecutivas Antiparalelas Completas (CCAPC)	77
4.5	Quebra de Ergodicidade para CCAPI e CCP	91
4.5.1	A impossibilidade de haver infinitos ciclos de CCAPI-CCP	91
4.5.2	CCP interrompidas por uma colisão AP completa	94
4.5.3	Ocorrência, ou de colisão AP incompleta, ou de P ou de AP completa após CCP	96
5	Conclusão	100
A	Ergodicidade em Sistemas Simples	103
A.1	Oscilador Harmônico Simples Unidimensional	103
A.2	O Mapa de Rotações	104
A.3	Oscilador Harmônico Simples Bidimensional	105
B	Grupo Diedral	106
B.1	Grupo	106
B.2	Grupo Diedral	106
B.3	Grupo Multiplicativo Cíclico	107
C	Cálculos Referentes às Colisões Consecutivas	108
C.1	Colisões Consecutivas Paralelas	108
C.1.1	Caso $\gamma > 1$	108

C.1.2	Caso $\gamma < 1$	114
C.2	Colisões Consecutivas Antiparalelas Incompletas	118
C.2.1	Caso $\gamma > 1$	118
C.2.2	Caso $\gamma < 1$	121
C.2.3	Posições de colisão para CCAPI	123
C.3	Colisões Consecutivas Antiparalelas Completas	125
C.3.1	As partículas chegam às paredes simultaneamente	125
C.3.2	As partículas não chegam às paredes simultaneamente	126
C.3.3	Condições de validade para as equações de previsão do número de CCAPC	129
D	Colisões Consecutivas Paralelas em sentidos opostos	135
D.1	Primeira colisão paralela a velocidades positivas	135
D.2	Primeira colisão paralela a velocidades negativas	137
E	Prova da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$ para alguns valores de γ	140
E.1	Polinômios de Chebyshev de primeiro tipo	140
E.2	Dedução da expressão para a prova da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$	141
E.2.1	$\gamma = 2$	142
E.2.2	$\gamma = 4$	142
E.2.3	$\gamma = 150$	142
	Referências Bibliográficas	143

Introdução

Ergodicidade é uma propriedade dinâmica de sistemas físicos correspondendo ao acesso em todo o Espaço de Fase energeticamente disponível em um período de tempo infinito. Esta ideia surgiu com Ludwig Boltzmann (1844-1906) em sua busca na redução da Termodinâmica aos fundamentos da Mecânica Clássica [1].

Mesmo para sistemas conservativos, a Mecânica Clássica, que é uma teoria reversível no tempo ⁽¹⁾, determinista ⁽²⁾ e usualmente aplicável a sistemas simples e com poucas partículas, se contrapõe à Termodinâmica, que se ocupa geralmente com sistemas físicos com muitas partículas (da ordem de 10^{23}) e irreversíveis.

O desafio imediato para a proposta de Boltzmann era em determinar todas as equações de movimento e condições iniciais de posição e velocidade para cada uma das partículas do sistema termodinâmico. Rudolf Clausius (1822-1888) e James C. Maxwell (1831-1879) já haviam contornado este problema através da Teoria Cinética dos Gases, introduzindo uma abordagem estatística aliada as propriedades cinéticas das partículas do gás em equilíbrio térmico [1]. Isto possibilitou a determinação das grandezas macroscópicas, como pressão e temperatura, em termos de valores médios de grandezas microscópicas das partículas, como velocidade e energia cinética. Assim, embora estivesse implícito que cada partícula do gás se move de acordo com a Mecânica Clássica, a descrição do comportamento do gás é puramente estatística e não mecânica. Restava ainda a questão de como explicar mecanicamente a irreversibilidade macroscópica diante da reversibilidade microscópica das partículas constituintes do sistema. Em vista disso, Boltzmann aprimorou a abordagem estatística da Teoria Cinética dos Gases de sistemas em equilíbrio térmico, aliando as leis

¹As leis de movimento não mudam com a troca de t por $-t$.

²Conhecida a lei de movimento e as condições iniciais do sistema, pode-se determinar a dinâmica do sistema físico em qualquer instante do passado ou do futuro.

da Mecânica Clássica a uma abordagem estatística, através de *ensembles* ou conjuntos estatísticos. Os *ensembles* estatísticos de Boltzmann baseiam-se no espaço formado por todos os estados possíveis acessíveis pelo sistema (Espaço de Fase), ao invés do espaço constituído por todas as partículas individuais do gás na Teoria Cinética. Então, como o sistema está em equilíbrio térmico, Boltzmann considerou fisicamente razoável se supor que a média temporal de uma determinada grandeza física pudesse ser substituída pela média espacial do *ensemble* estatístico desta mesma grandeza física, coincidindo com a grandeza macroscópica correspondente; por conseguinte, a trajetória do sistema passa por todos os pontos do Espaço de Fase acessíveis. Esta é a Hipótese Ergódica de Boltzmann [1]. O *ensemble* estatístico, denominado por Willard Gibbs (1839-1903) de *ensemble* microcanônico, possibilitou resolver o problema da irreversibilidade macroscópica versus reversibilidade microscópica pela interpretação estatística da entropia [2].

Percebemos com isto que a Mecânica Estatística Clássica ocupa-se de sistemas com um número muito grande de partículas, de maneira que a abordagem estatística é fundamental na relação entre o grande número de graus de liberdade microscópicos com uma quantidade reduzidíssima de grandezas macroscópicas (pressão, temperatura, volume, etc.). Além disso, a descrição estatística via *ensemble* estatísticos não remete necessariamente a existência de algum fator aleatório subjacente, mas à desconsideração de detalhes irrelevantes para a descrição do sistema [3].

No final do século XIX, porém, Jules H. Poincaré (1854-1912) mostrou que o problema da Mecânica Celeste de 3 corpos interagindo gravitacionalmente entre si é insolúvel analiticamente [4], ou seja, ao contrário do seu análogo de 2 corpos, é impossível se obter analiticamente as trajetórias de cada um dos 3 corpos conhecendo-se a lei de movimento e as condições iniciais. Isto exemplifica que mesmo um sistema físico com poucos graus de liberdade pode ter sua solução analítica impossibilitada. Este problema, que já vinha sendo estudado, entre outros, por Jouseph-Louis Lagrange (1736-1813) e Pierre S. Laplace (1749-1827), foi abordado por Poincaré, que aplicou seu estudo qualitativo de propriedades topológicas de soluções de equações diferenciais [5], inaugurando a Teoria do Caos [6]. Outros exemplos de sistemas igualmente simples, que não tem solução analítica geral, são o pêndulo duplo [7] e o sistema de Lorenz [8]. Sistemas físicos como estes são denominados de sistemas caóticos e caracterizam-se por apresentarem soluções das equações de movimento completamente diferentes para condições iniciais muito próximas (sensibilidade às condições iniciais). Vale citar que, apenas a partir de 1963, o estudo de sistemas caóticos avançou substancialmente pelo emprego da computação científica na análise das soluções de modelos não-lineares de previsão climática pelo meteorologista

Edward N. Lorenz (1917-2008). Isto permitiu estender a Teoria do Caos de Sistemas Dinâmicos além do domínio físico e matemático, como Economia [9], Mercado Financeiro [10], Criptografia, Ecologia [11], Biologia e Medicina [12], Dinâmica Populacional [13], Química [14], Engenharia [15], etc.

A irregularidade dinâmica para sistemas físicos simples sugere a aplicação de, ao menos, alguns conceitos mecânico-estatísticos, como a validade da Hipótese Ergódica. George D. Birkhoff (1884-1944) provou o Teorema Ergódico (equivalência de médias temporais e médias sobre *ensembles*) [16] em 1931 a partir da ideia de medida invariante (Teoria da Medida) sob a evolução dinâmica do sistema físico [17] e John von Neumann (1903-1957) provou a Hipótese Quase-Ergódica (equivalência, em média, de médias temporais e médias sobre *ensembles*) [18] em 1932, aproximando formalmente a Mecânica Estatística Clássica da Teoria dos Sistemas Dinâmicos. Os resultados de Birkhoff e von Neumann é bastante representativo, porque o enunciado de Boltzmann requer que a trajetória do sistema acesse todos os pontos do Espaço de Fase, condição esta raramente satisfeita para a maioria dos casos analisados. Birkhoff e von Neumann, por outro lado, propuseram condições menos restritivas que a de Boltzmann para que um sistema exiba ergodicidade, não precisando passar nem por todos os pontos (conjuntos de medida nula) e nem pelos mesmos pontos (acesso às vizinhanças desses pontos) do Espaço de Fase.

Outro sistema dinâmico simples que pode exibir comportamento irregular é o bilhar, que consiste em uma região geométrica qualquer delimitada contendo uma partícula se movendo em seu interior. Para citar alguns exemplos, o bilhar é usado em investigações teóricas de propriedades dinâmicas, como ergodicidade, caos [19] e limite clássico-quântico [20], assim como realizações experimentais para investigar essas questões via aprisionamento atômico [21], além de servir na compreensão de fenômenos de transporte, como a retificação de condutância térmica em materiais [22], e também como a geometria de bilhares semicondutores influenciam em sua magnetoresistência [23].

Inspirado no problema de um gás com N partículas, Yakov G. Sinai (1935-) propôs uma variante da Hipótese Ergódica de Boltzmann, afirmando que um sistema de $N \geq 2$ partículas sobre um toro é ergódico (Hipótese de Boltzmann-Sinai) [24]. Mas, apenas em 1970, Sinai provou para o caso particular de 2 partículas que o sistema é caótico e ergódico através de um bilhar [19]. Mesmo assim, o resultado de Sinai é relevante porque mostrou que irregularidade dinâmica emerge mesmo para sistemas com poucas partículas.

Uma versão do problema geral de Sinai é o de um gás de N partículas quaisquer, confinadas em uma região finita unidimensional, colidindo elasticamente entre si. Para um gás de Boltzmann nessas condições [25], a função distribuição das velocidades é maxwelliana

e, das posições, é constante para mais de 2 partículas, resultado condizente com comportamento ergódico. Entretanto, isto não foi observado para 2 partículas por causa de uma persistência de colisões gerando as mesmas velocidades. Esta perda de ergodicidade foi melhor analisada por Manabu Hasegawa, que identificou aspectos na dinâmica do sistema causadores da quebra de ergodicidade [26]. Este caso particular tem se mostrado desafiador com respeito à ergodicidade. A literatura tem abordado também este problema alternativamente com a sua versão equivalente a um bilhar triângulo retângulo.

Giulio Casati e colaboradores observaram numericamente tanto uma aparente uniformidade na distribuição de pontos no espaço de velocidades e nas Seções de Poincaré [27], quanto a proximidade dos valores das funções correlação espacial e temporal [28] para o bilhar com um dos seus ângulos agudos múltiplo irracional de π (bilhar irracional), indicando que o sistema é ergódico e possivelmente *mixing* ou mesclado, uma propriedade mais forte que a ergodicidade. Ao contrário do que se esperava, por causa dos resultados obtidos por Sinai, foi descartada a possibilidade de o sistema ser caótico [27], pois tanto as trajetórias próximas em relação às posições iniciais, quanto aquelas em relação às velocidades iniciais, apresentaram divergência linear. Argumentos analíticos suportando, mas não provando, essas conclusões foram dadas por Arthur Hobson em [29].

Este problema, e sua generalização poligonal, tem ocupado também muitos matemáticos há décadas, contribuindo para o desenvolvimento da Teoria Ergódica. Alguns resultados interessantes provados são: a identificação de apenas 4 polígonos racionais integráveis (retângulo, triângulo equilátero, triângulo retângulo isósceles e triângulo retângulo com um ângulo igual a $\frac{\pi}{3}$ rad) [30, 31], bilhares poligonais são tipicamente ergódicos, assim como o bilhar triângulo retângulo [32], e a existência de trajetórias periódicas em qualquer bilhar triângulo retângulo [33–35]. Vale destacar que essa ergodicidade está associada ao preenchimento do bilhar, identificado como Espaço de Fase, por um conjunto de trajetórias da partícula (fluxo) e não por uma única trajetória, como é feito usualmente em Física. Seguimos aqui a praxe em Física.

Apesar das evidências numéricas apontando para a ergodicidade no bilhar triângulo retângulo, J. Wang, G. Casati e T. Prosen revisitaram recentemente esse problema [36]. Eles observaram numericamente o fenômeno de localização exponencial de órbitas em certas porções do Espaço de Fase para bilhares triângulo retângulo associados a irracionais típicos. Conjeturaram ainda que a ergodicidade ocorreria apenas quando o número irracional for de Liouville ⁽³⁾, devido a precisão exponencial de seus aproximantes racio-

³Um número irracional de Liouville é todo número irracional que é muito bem aproximado por um número racional. Exemplo: irracional de Liouville $N_l = 0,110001000000000000000001\dots = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{10^i}$.

nais [37] e, por conseguinte, evitando o fenômeno de localização exponencial de órbitas. Além disso, como há muito menos irracionais de Liouville que os demais irracionais, isto justificaria a raridade de se observar numericamente a ergodicidade nesses sistemas.

Desta forma, dada a importância teórica e as aparentes contradições apresentadas na literatura, nesta dissertação discutimos o comportamento do sistema constituído por 2 partículas pontuais de massas quaisquer e interagindo apenas por colisões elásticas entre si e com as paredes que as confinam numa região limitada unidimensional. Tal sistema é equivalente a um bilhar triângulo retângulo.

Mais especificamente, estudamos os mecanismos dinâmicos responsáveis pela geração de novas velocidades para as partículas à medida que evoluem no tempo, sofrendo assim sucessivas colisões. Para este fim, realizamos simulações numéricas e desenvolvemos uma classificação analítica das diferentes trajetórias das partículas, além de investigar as propriedades destas trajetórias. Nossos resultados aqui, apesar de aprofundar o entendimento do problema, ainda não são suficientes para finalmente provar se o sistema é ou não ergódico. Entretanto, esperamos que nossa análise contribua para se resolver futuramente esse dissenso. Do ponto de vista fundamental, isto é importante porque, se o sistema for ergódico para parâmetros apropriados, isto significaria que sistemas tão simples, com duas partículas em uma região unidimensional, já poderiam apresentar características relevantes que permitam descrições mecânico-estatísticas corretas, mostrando assim o grande alcance da Mecânica Estatística.

A dissertação está dividida na seguinte forma: no Capítulo 2 abordamos de forma construtiva os conceitos básicos de Mecânica Analítica, como equação de movimento, transformações canônicas e integrabilidade. Em seguida, definimos sistemas dinâmicos, discutindo os métodos de análise (discretização de um sistema dinâmico contínuo) e a diferença entre movimento regular e caótico. Na seção seguinte, distinguimos ergodicidade e mesclagem e tratamos de alguns exemplos simples, mas importantes conceitualmente (oscilador harmônico, mapa de rotação, etc.). Finalmente, apresentamos as definições existentes a respeito de bilhares e suas características dinâmicas. No Capítulo 3 discutimos sobre o bilhar triângulo retângulo e a sua relação com o sistema de 2 partículas colidindo elasticamente em uma região finita unidimensional. Apresentamos também resultados numéricos importantes sobre os tipos básicos de trajetórias ou configurações de movimento das partículas (paralela ou antiparalela), o Espaço de Estado (velocidades normalizadas), o Espaço de Fase e Seções de Poincaré. No Capítulo 4 detalhamos analiticamente como é a geração de velocidades e como isto contribui para a sua lentidão ou a sua frustração (quebra da ergodicidade).

Aspectos Gerais sobre Dinâmica em Mecânica Clássica

2.1 Um Panorama sobre os Formalismos Analíticos da Mecânica Clássica

A Mecânica Clássica fundamenta-se no paradigma determinista, o qual estabelece, para um sistema qualquer, a determinação completa de sua trajetória no tempo, uma vez determinadas todas as forças, posições e velocidades dos seus constituintes em um instante inicial. Isto é expresso pela 2ª Lei de Newton, uma equação diferencial relacionando a variação temporal da quantidade de movimento linear (momento linear) com a força resultante sobre o sistema. Para o caso particular de uma única partícula de massa constante m , movendo-se no espaço euclidiano tridimensional e sujeita a uma força resultante $\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \dot{\mathbf{r}}(t), t)$, temos

$$m\ddot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \dot{\mathbf{r}}(t), t), \tag{2.1}$$

em que $\mathbf{r}(t)$, $\dot{\mathbf{r}}(t)$ e $\ddot{\mathbf{r}}(t)$ são a posição, a velocidade e a aceleração no instante t . A trajetória da partícula $\mathbf{r}(t)$ é determinada resolvendo-se a Eq. (2.1) a partir de $\mathbf{r}(0)$, $\dot{\mathbf{r}}(0)$ conhecidos.

No entanto, o formalismo newtoniano apresenta dificuldades de aplicação em sistemas físicos não triviais. Nem sempre é possível determinar todas as forças atuantes para a resolução do problema, como as forças de vínculo que restringem o movimento dos constituintes do sistema, ou as forças atuantes em um sistema microscópico. Em vista disso, Lagrange desenvolveu um formalismo equivalente ao newtoniano, mas independente do conceito de força. A descrição do sistema no formalismo de Lagrange baseia-se na dife-

rença entre a energia cinética e a potencial, denominada de lagrangiana, uma quantidade escalar que depende das coordenadas e velocidades generalizadas dos constituintes do sistema. O termo “generalizado” deve-se a não restrição dessas coordenadas àquelas de um sistema de coordenadas ortogonais. Isto permite a invariância da lagrangiana em relação às transformações de coordenadas. Além de se ocupar de propriedades associadas ao corpo, opondo-se às propriedades atuantes em um corpo, como no formalismo newtoniano, formalismos fundamentados em energia possibilitaram a extensão da abordagem mecânica a casos que carecem de definição satisfatória de força, como em Ótica, Mecânica Quântica e Teoria de Campos.

O formalismo de Lagrange da mecânica, a Mecânica Lagrangiana, parte do Princípio de Hamilton de Mínima Ação [38]:

“De todos os caminhos possíveis nos quais um sistema dinâmico pode se mover de um ponto ao outro em um determinado intervalo de tempo, o caminho real seguido será aquele que minimiza a integral de tempo da lagrangiana (ação)”.

Considere um sistema com n partículas no espaço tridimensional. As coordenadas cartesianas em função de coordenadas ou posições generalizadas é dada por $x_{jk} = x_{jk}(q_i, t)$, com $j = 1, \dots, n$, $k = 1, 2, 3$ e $i = 1, \dots, f$; aqui, $f = 3n - m$ é o número de coordenadas generalizadas independentes (graus de liberdade) e m é o número de equações de vínculo descrevendo as restrições sobre algumas das $3n$ coordenadas e, por conseguinte, restringindo o movimento do sistema. Assim sendo, para a lagrangiana $\mathcal{L}(q_1(t), \dots, q_f(t), \dot{q}_1(t), \dots, \dot{q}_f(t), t) \equiv \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$, com as posições q_i e velocidades generalizadas \dot{q}_i , a ação S é definida como

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt. \quad (2.2)$$

A minimização da ação, $\delta S = 0$, resulta na equação de Euler-Lagrange [38],

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)}{\partial q} = 0, \quad (2.3)$$

em que $q_i = q_i(x_{jk}, t)$. Os possíveis movimentos do sistema são representados no Espaço de Configuração \mathbb{C}^f , que é o conjunto de todas as f coordenadas generalizadas q_i . Cada um desses pontos representa uma família de curvas ou condições iniciais do sistema. O Espaço de Configuração é mais interessante quando há vínculos, porque assim estará exibido em \mathbb{C}^f apenas os possíveis movimentos do sistema. A equação de Lagrange fornece a lei de movimento para o sistema, como acontece para a 2ª Lei de Newton. Ela é uma equação

diferencial de segunda ordem em q_i . Para um sistema de f graus de liberdade, portanto, será necessário resolver f equações de Euler-Lagrange com as m equações de vínculo, assim solucionando o problema conforme o paradigma determinista.

A lagrangiana anteriormente definida é bastante geral. No entanto, muitos problemas simples, mas úteis para se compreender aspectos físicos mais relevantes de sistemas mais complicados, são mais restritivos quanto às coordenadas $q_i = q_i(x_{jk}, t)$. Normalmente, essas coordenadas independem do tempo, significando a ausência de movimento relativo entre o sistema de coordenadas referente a x_{jk} e q_i . Isto implica na dependência apenas das velocidades generalizadas \dot{q}_i pela energia cinética. Outra restrição comum é a dependência exclusiva das coordenadas q_i pela energia potencial, ou seja, restringem-se às forças conservativas. Exemplos disso são a partícula livre, o oscilador harmônico simples e o movimento de um sistema de partículas sob um campo gravitacional. Logo, a lagrangiana fica

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \sum_{i=1}^f \left(\frac{m_i \dot{q}_i^2}{2} - U(q_i) \right). \quad (2.4)$$

Calculando-se a variação da lagrangiana com a velocidade generalizada para a i -ésima coordenada, obtemos o momento linear,

$$\frac{\partial \mathcal{L}_i(q_i, \dot{q}_i)}{\partial \dot{q}_i} = m_i \dot{q}_i \equiv p_i, \quad (2.5)$$

denominado de momento canônico generalizado associado à posição generalizada q_i .

Note que a lagrangiana da Eq. (2.4) independe do tempo, evidenciando que é uma quantidade conservada. Então, derivando-a em relação ao tempo,

$$\frac{d\mathcal{L}(q, \dot{q})}{dt} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i)}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i)}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right);$$

combinamos com a equação de Euler-Lagrange sem o tempo e usamos a Eq. (2.5), para obter

$$\frac{d}{dt} \left(\mathcal{L}(q, \dot{q}) - \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i \right) = 0.$$

A integração desta equação nos dá a Transformação de Legendre,

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) - \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i = -\mathcal{H}(q, p), \quad (2.6)$$

fornecendo uma outra quantidade conservada. Lembrando das restrições feitas às energias

cinética e potencial, e sabendo que decorre do Teorema de Euler [39]

$$\sum_{i=1}^f \dot{q}_i \frac{\partial K(\dot{q}_i)}{\partial \dot{q}_i} = 2K(\dot{q}),$$

obtemos, enfim, a hamiltoniana

$$\mathcal{H}(q, p) = K(\dot{q}) + U(q), \quad (2.7)$$

equivalendo à conservação da energia total do sistema. Se diferenciarmos a hamiltoniana $\mathcal{H}(q, p)$ e a Eq. (2.7) e igualarmos os mesmos termos em dq_i e dp_i , obtemos as equações de movimento de Hamilton independente do tempo,

$$\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial q}, \quad (2.8)$$

as equações básicas do formalismo hamiltoniano da Mecânica.

O formalismo hamiltoniano tem a vantagem adicional ao lagrangiano por se basear em 2 equações diferenciais de primeira ordem. O momento canônico generalizado é independente da posição generalizada. Assim, o conjunto de todos os pontos ou fases (q, p) constituem um espaço vetorial $2f$ -dimensional denominado de Espaço de Fase \mathbb{P}^{2f} e a hamiltoniana, assim como a lagrangiana, é um funcional (uma transformação que associa vetores a escalares). Por causa da presença do momento generalizado, o Espaço de Fase permite estudar explicitamente as trajetórias dinâmicas do sistema, o que não acontece para o Espaço de Configuração \mathbb{C}^f .

Uma propriedade importante do Espaço de Fase \mathbb{P}^{2f} é a conservação do volume de seus pontos no decorrer do tempo. Para se verificar isto, interpretemos o conjunto de pontos (q, p) como um fluido de volume V delimitada por uma superfície S [40] (Fig. 2.1). O movimento desse fluido é descrito por um campo vetorial \mathbf{v} . Então, a variação temporal do volume V de um fluido atravessando uma superfície S é, pelo Teorema da Divergência,

$$\frac{dV}{dt} = \int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS = \int_V \nabla \cdot \mathbf{v} dV.$$

Sendo $\mathbf{v} = (\dot{q}, \dot{p})$ e $\nabla = (\frac{\partial}{\partial q}, \frac{\partial}{\partial p})$, a aplicação das Equações de Hamilton, conduz à $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$; logo, o volume do Espaço de Fase é preservado. Este é o Teorema de Liouville.

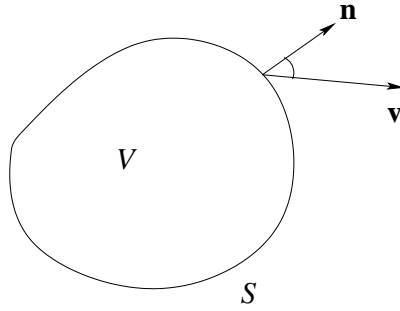


Figura 2.1: Ilustração do Teorema de Liouville: um fluxo no Espaço de Fase em um volume V delimitada por uma superfície S .

2.2 Integrabilidade

Em princípio, para um sistema com f graus de liberdade, há $2f$ equações de Hamilton para se resolver. Mas, para um sistema autônomo, a hamiltoniana independe do tempo, equivalendo-se à energia total do sistema, $\mathcal{H}(q, p) = E$. Isto define uma superfície 1-dimensional no Espaço de Fase. Então, restam a resolução das outras $2f - 1$ equações de movimento. Havendo outras quantidades conservadas, reduz-se gradativamente o número de equações diferenciais a serem resolvidas e aumenta-se a dimensão da superfície limitadora das trajetórias. O caso mais simples ocorre quando há f quantidades conservadas (constantes de movimento ou integrais isoladas) $\mathcal{C}_i(q, p)$, pois assim a trajetória do sistema, limitada agora por uma superfície f -dimensional em \mathbb{P}^{2f} , fica completamente determinada. Além disso, se essas constantes de movimento forem tais que $\nabla \mathcal{C}_i(q, p)$ sejam linearmente independentes e seu Parênteses de Poisson $[C_i(q, p), C_j(q, p)] = 0$, em que

$$[C_i(q, p), C_j(q, p)] = \sum_{k=1}^f \left(\frac{\partial \mathcal{C}_i(q, p)}{\partial q_k} \frac{\partial \mathcal{C}_j(q, p)}{\partial p_k} - \frac{\partial \mathcal{C}_i(q, p)}{\partial p_k} \frac{\partial \mathcal{C}_j(q, p)}{\partial q_k} \right),$$

o sistema é dito um *sistema integrável de Liouville*.

Sistemas integráveis permitem uma mudança de coordenadas que trivializa o hamiltoniano, expressando-o apenas em termos das constantes de movimento, resolvendo-se imediatamente o problema. Para que isto seja possível, a transformação de coordenadas deve preservar as equações de movimento de Hamilton. Tais transformações denominam-se *transformações canônicas*. Assim sendo, para qualquer $(q, p) \in \mathbb{P}^{2f}$ e $(Q(q, p), P(q, p)) \equiv (Q, P) \in \mathcal{P}^{2f}$, impomos a independência da langrangiana em relação à posição Q , implicando que o momento P é uma constante de movimento, conforme as

Eqs. (2.3) e (2.5). Como (Q, P) deve ser canônica, temos

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial \mathcal{K}(P)}{\partial P_i}, \quad (2.9a)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial \mathcal{K}(P)}{\partial Q_i}, \quad (2.9b)$$

sendo $\mathcal{K}(P)$ a nova hamiltoniana. Resolvendo-se as Eqs. (2.9a) e (2.9b), obtemos

$$Q_i = Q_{i0} + \omega_i t, \quad P_i = I_i,$$

com $\omega_i = \frac{\partial \mathcal{K}(P)}{\partial P_i}$ e I_i constante. Consequentemente, $\mathcal{K}(P) = \omega P$, coincidindo com a $\mathcal{H}(q, p)$, pois o sistema é autônomo.

Pelo teorema de Liouville, a área da superfície definida pelos dois conjuntos de variáveis canônicas é preservada e constante,

$$\iint_{S_i} dq_i dp_i = \iint_{S'_i} dQ_i dP_i.$$

Como o sistema é integrável, pares diferentes de (q_i, p_i) são independentes entre si. Charles-Eugène Delaunay (1816-1872), um astrônomo francês [41], percebeu que sistemas separáveis apresentam uma periodicidade intrínseca, seja por causa da hamiltoniana $\mathcal{H}(q, p)$ ser quadrática em p_i , limitando os valores de q_i em um intervalo finito (libração), seja por p_i ser função periódica de q_i (rotação) [39]. Ambos os casos mostram que o plano definido pelos valores de (q_i, p_i) é limitado. Então, o mesmo vale para (Q_i, P_i) ; por isso, assumamos que Q_i é periódica com período 2π . Então, sendo $P_i = I_i$ constante e assumindo que $p_i = p_i(q)$, de modo que $p_i = \int dp_i$, segue-se que a variável de ação é

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \int p_i dq_i. \quad (2.10)$$

Como Q_i é periódica, a definimos como uma variável de ângulo ϕ . Portanto, as variáveis de ação e ângulo nos dão a transformação canônica entre (q, p) e $(Q, P) \equiv (\phi, I)$. A solução re-escrita fica

$$I_i = c_i, \quad \phi_i = \phi_{i0} + \omega_i t, \quad (2.11)$$

com c_i uma constante, $\phi_i \in [0, 2\pi]$. Esta solução é interessante porque I_i e ϕ_i representam, para cada i , o raio e a trajetória sobre uma circunferência \mathbb{S}^1 , respectivamente. Considerando todas as variáveis ângulo, temos o produto cartesiano de f circunferências \mathbb{S}^1 , que define topologicamente um toro f -dimensional, $\mathbb{T}^f = \mathbb{S}^1 \times \dots \times \mathbb{S}^1$. A Fig. 2.2 ilustra um caso particular dessa relação.

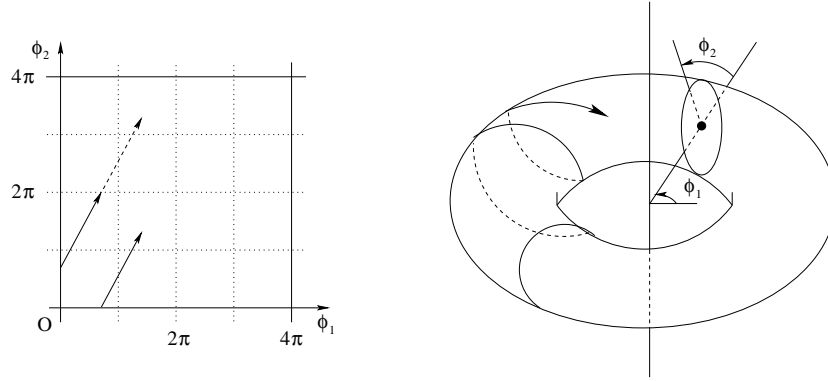


Figura 2.2: Relação entre variáveis de ação-ângulo e o toro invariante \mathbb{T}^2 : como as variáveis ângulo são periódicas, no gráfico $\phi_1 - \phi_2$, a parte da trajetória que está fora do intervalo $[0, 2\pi]$ (segmento pontilhado), é reposicionado nesse intervalo. Isto corresponde à trajetória periódica no toro.

As trajetórias de um sistema integrável confinam-se topologicamente em um toro. A variável ação I_i localiza o toro onde se encontra o sistema, enquanto as variáveis ângulo determinam as respectivas coordenadas. Para cada condição inicial, a trajetória restringe-se ao movimento periódico de frequência ω_i em um desses toros e, por isso, são qualificados como toros invariantes.

Para o caso de dimensão maior que 1, duas situações podem acontecer: a primeira é o toro \mathbb{T}^f densamente preenchido quando as frequências ω_i são racionalmente independentes. Isto ocorre porque, após um tempo longo o suficiente, a trajetória retorna arbitrariamente próxima do ponto de partida no toro. Isto caracteriza o movimento quase-periódico. A segunda situação refere-se à formação de toros ressonantes, ocorrendo quando as frequências ω_i são racionalmente dependentes.

Sistemas integráveis servem de referência para se entender sistemas físicos mais complicados não-integráveis, por exemplo, via teoria perturbativa. Isto significa que, para certas condições, um sistema não-integrável possa ser tratado como um sistema integrável acrescentado de algum parâmetro de valor relativamente pequeno com relação a magnitude das grandezas básicas do sistema. Analisa-se, então, o comportamento dos toros invariantes em função desse parâmetro perturbativo. O Teorema KAM responde parcialmente essa questão afirmando que, diante de uma perturbação desprezível, toros ressonantes são destruídos, enquanto que as órbitas quase-periódicas, cuja razão de frequências ω_i é mal aproximada por números racionais, persistem no toro [42, 43].

2.3 Sistemas Dinâmicos

Sistema dinâmico é um sistema de equações que determinam o estado do sistema no tempo. Essa dependência temporal pode ser:

Contínua: o sistema dinâmico é um sistema de N equações diferenciais ordinárias de primeira ordem

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)), \quad \text{com} \quad \mathbf{x}(t) = (x_1(t), \dots, x_N(t)); \quad (2.12)$$

Discreta: o sistema dinâmico é um sistema de N equações de diferença finita ou mapas

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_n), \quad \text{com} \quad \mathbf{x}_n = (x_n^{(1)}, \dots, x_n^{(N)}), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.13)$$

As Eqs. (2.12) e (2.13) são equações matriciais com termos dependentes entre si ou acoplados. Este acoplamento decorre da definição das derivadas e termos não-lineares como novas variáveis, obtendo-se um sistema de equações, diferenciais ou de diferença finita, de primeira ordem. Note também que essas equações independem do tempo e, caso a equação original tenha uma dependência explícita no tempo, considera-a como variável extra, para se ter um sistema dinâmico autônomo. Quando essas equações são lineares, usa-se os recursos disponíveis pela Álgebra Linear na investigação das soluções. Mas, se forem não-lineares, utiliza-se, por exemplo, a linearização de soluções. A linearização consiste na aproximação linear das soluções por expansão em série de potências em relação aos pontos de equilíbrio, pontos $\mathbf{x}^{(*)}(t)$ e $\mathbf{x}_n^{(*)}$ tais que $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(*)}(t)) = \mathbf{0}$ e $\mathbf{f}(\mathbf{x}_n^{(*)}) = \mathbf{x}_n^{(*)}$ [6]. Esta abordagem, remontando ao trabalho de Poincaré no fim do século XIX, é uma abordagem analítica simples que nos fornece informações importantes da solução, sem se conhecer a solução exata que, por muitas vezes, sequer é viável.

As soluções das Eqs. (2.12) e (2.13) são transformações $\mathbf{x} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N$ e $\mathbf{x} : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}^N$ denominadas de trajetória ou órbita associada ao campo vetorial $\mathbf{F}, \mathbf{f} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ do sistema em um determinado espaço, como o Espaço de Fase na mecânica hamiltoniana, que nos dá uma visão geral das propriedades dinâmicas do sistema. É praxe, então, se investigar o quanto duas trajetórias muito próximas se separam no tempo. Isto informar-nos-á sobre a previsibilidade do sistema para tempo suficientemente longo. Para um sistema linear, no sentido usual da Álgebra Linear, a previsibilidade assintótica é garantida. Porém, não necessariamente para um sistema não-linear. Neste caso, as trajetórias podem divergir não-linearmente, por exemplo, uma divergência polinomial ou exponencial. Para uma divergência exponencial, a previsibilidade assintótica é inviável. Quando isto acontece, o sistema exibe uma dinâmica caótica. Não se deve confundir imprevisibilidade com

aleatoriedade, pois esta não advém de um sistema determinístico de equações como aquela, ou seja, sistemas dinâmicos caóticos mantêm ainda a relação de causa-efeito.

Esta divergência entre trajetórias vizinhas é quantificada pelo expoente de Lyapunov: tomando 2 condições iniciais $\mathbf{x}(0)$ e $\mathbf{y}(0)$ tal que $|\mathbf{x}(0) - \mathbf{y}(0)| = r(0)$, com $r(0)$ arbitrariamente pequeno, se elas divergirem exponencialmente quando aplicadas à Eq. (2.12) após um tempo t , $r(t) = r(0)e^{\Lambda(t)}$, com $|\mathbf{x}(t) - \mathbf{y}(t)| = r(t)$, o expoente de Lyapunov máximo assintótico será

$$\Lambda = \lim_{r(0) \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{r(t)}{r(0)},$$

ou seja, $\Lambda > 0$ para divergência exponencial de trajetórias; a isto que entendemos como sensibilidade às condições iniciais. Para $\Lambda < 0$, temos uma convergência das trajetórias, correspondendo à dinâmica periódica ou quase-periódica. O caso $\Lambda = 0$ é indecidível. Na maioria dos sistemas dinâmicos, o cálculo dos expoentes de Lyapunov é realizado numericamente e, por ser a tempo finito, determina-se o seu valor médio a partir de uma grande quantidade de condições iniciais, valor este que se aproxima muito bem do assintótico. Tem-se qualitativamente o mesmo para sistemas dinâmicos discretos [6].

Sistemas dinâmicos discretos são mais simples que os contínuos, bastando se especificar a condição inicial \mathbf{x}_0 e aplicar recursivamente a regra dada pela Eq. (2.13). Em vista disso, Poincaré desenvolveu um método de discretização de sistemas dinâmicos contínuos, denominado de Seção de Poincaré (SP) ou Mapa de Retorno [6], transformando um sistema dinâmico contínuo N-dimensional em um sistema discreto (N-1)-dimensional. Ele é construído da seguinte maneira: dada uma trajetória $\mathbf{x}(t)$ e um plano SP transversalmente posicionado a $\mathbf{x}(t)$, ela o interseccionará de acordo com uma condição arbitrariamente escolhida (Fig. (2.3)). Por exemplo, pode-se impor que $\mathbf{x}(t)$ atravessará SP sempre que a

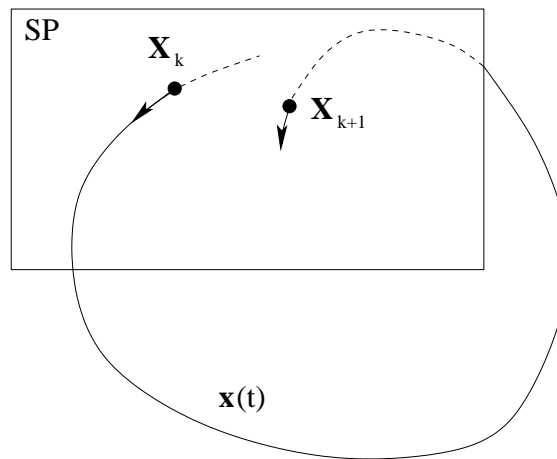


Figura 2.3: Ilustração da Seção de Poincaré (SP): a intersecção da trajetória $\mathbf{x}(t)$ origina uma sequência de pontos \mathbf{X}_k no plano transversal à trajetória.

coordenada $x_i(t) > 0$; isto definirá um mapa $\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{P}(\mathbf{X}_k)$, sendo \mathbf{P} uma transformação invertível que associa cada \mathbf{X}_k ao seu subsequente. Ao longo do tempo, no plano SP haverá um conjunto de pontos representante da dinâmica do sistema. A escolha da condição deve ser o mais conveniente para o objetivo da análise da dinâmica. Outra possibilidade de condição é a intersecção da trajetória sempre que se passar por um ponto de equilíbrio; assim, pode-se entender como são as trajetórias vizinhas a esse ponto. No entanto, as Seções de Poincaré apresentam duas dificuldades que restringem a sua aplicabilidade em situações gerais. Uma delas se refere à impossibilidade de se conhecer explicitamente a transformação invertível \mathbb{P} , tanto analítica, quanto numérica. O que se faz na maioria dos casos é a geração numérica da representação gráfica da Seção de Poincaré para um estudo qualitativo, mas sem ser possível explicitar \mathbb{P} . A outra dificuldade está na visualização da Seção de Poincaré. Em princípio, poderíamos gerar matematicamente uma Seção de Poincaré em qualquer dimensão, mas a sua visualização máxima é no espaço tridimensional. Um exemplo de mapa de Poincaré é o Mapa de Hénon [44], uma discretização bidimensional do sistema de Lorenz, um sistema de equações diferenciais tridimensional [6]. Exemplos de uso de Seções de Poincaré tridimensionais são encontrados em fenômenos de transporte de fluidos [45] e em controle experimental de caos em máquinas de plasma [46]. É possível também discretizar um sistema dinâmico N -dimensional de maneira que a Seção de Poincaré seja, no máximo, tridimensional. Para que isto aconteça basta existir $N-3$ constantes de movimento. Um exemplo disso é o sistema hamiltoniano de duas partículas quaisquer interagentes entre si; o sistema dinâmico tem dimensão 4 pois, como há 2 graus de liberdade, o Espaço de Fase é quadridimensional. No entanto, a energia total é uma constante de movimento, permitindo expressar um dos momentos em função da energia, do momento da outra partícula e da energia potencial, reduzindo-se o espaço disponível a um subespaço tridimensional do Espaço de Fase. Resta-nos definir uma das variáveis que seja conveniente, como a fixação da posição da partícula associada a velocidade escolhida anteriormente, para obtermos uma Seção de Poincaré, nesse caso, bidimensional.

A Seção de Poincaré não é a única forma de discretização de sistemas dinâmicos contínuos. Há outras técnicas:

Mapa T ou Mapa Estroboscópico [43]: é definido pela discretização temporal $t_n = t_0 + nT$, com T convenientemente escolhido, de tal forma que $\mathbf{X}_n \equiv \mathbf{x}(t_n)$ e $\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{M}(\mathbf{X}_n)$, com \mathbf{M} uma transformação invertível. Esta discretização é usada, por exemplo, na Equação de Duffing, que descreve um sistema massa-mola com constante elástica dependente da posição e sujeita a uma força externa periódica [6];

Mapeamento de colisões: para um sistema de partículas confinadas colidindo elasticamente entre si, este mapeamento consiste no registro da posição e momento de uma partícula previamente escolhida quando ela colidir com a parede ou com outra partícula. O conjunto de pontos de posição e momento constituirá o seu Espaço de Fase. Em particular, para o nosso caso de 2 partículas confinadas em um intervalo finito unidimensional, escolhemos a partícula **1** para registrar os pontos (x_1, p_1) em suas colisões com a parede e com a partícula **2**. Este mapeamento está diretamente associado ao algoritmo usado nos experimentos numéricos do nosso sistema físico e, por isso, é um dos métodos principais usados na dissertação. A descrição do algoritmo e os resultados numéricos estão no Capítulo 3.

2.4 Ergodicidade

O conceito de ergodicidade surgiu no desenvolvimento da Mecânica Estatística por Boltzmann, Maxwell e Gibbs na tentativa de embasar mecanicamente a Termodinâmica, explicando-se a emergência de propriedades macroscópicas irreversíveis a partir de propriedades microscópicas reversíveis dos constituintes do sistema termodinâmico. O sucesso dessa proposta é facilitado se o sistema termodinâmico for fechado e estiver em um estado de equilíbrio termodinâmico, no qual não há quaisquer variações macroscópicas perceptíveis de suas propriedades. Para um sistema hamiltoniano, a trajetória no Espaço de Fase é dada pelas fases (q, p) . Para se medir uma grandeza macroscópica G qualquer, realiza-se repetidamente várias medidas no decorrer do tempo por um período de tempo T e, por fim, considera-se o seu valor médio $\langle G \rangle$ ⁽¹⁾. Quanto maior o número de medidas realizadas, maior será o período de tempo, aproximando-se o valor médio do valor real da grandeza G ,

$$\langle G \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T G(q(t), p(t)) dt, \quad (2.14)$$

em que $G(q(t), p(t))$ é o valor da grandeza G no instante t . Então, $\langle G \rangle$ independe do tempo. Agora, considerando que todos os valores possíveis de G formem um conjunto estatístico (*ensemble*) no Espaço de Fase com uma densidade $\varrho(q, p)$, o valor médio $\langle G \rangle$ sobre esse conjunto é

$$\langle G \rangle = \frac{\int G(q, p) \varrho(q, p) dq dp}{\int \varrho(q, p) dq dp}. \quad (2.15)$$

¹Não usamos a notação tradicional de média temporal, \overline{G} , porque a usamos para denotar conjugação complexa.

Como supôs Boltzmann, estando o sistema termodinâmico em equilíbrio, as 2 médias da grandeza G devem coincidir, porque a média temporal assintótica considera todos os valores de medidas possíveis. Esta é a Hipótese Ergódica de Boltzmann, um artifício eficiente para se medir qualquer grandeza física, sem a submissão ao limite do tempo.

Uma maneira intuitiva que ilustra a Hipótese Ergódica é a seguinte: suponha que se deseja saber quantas caras são obtidas lançando-se uma moeda 1000 vezes. Assumindo-se verdadeira a Hipótese Ergódica, o resultado será aproximadamente o mesmo se, ao invés, lançarmos 1000 moedas idênticas de uma só vez. Consegue-se a igualdade entre os resultados à medida que se aumenta o número de lançamentos e de moedas.

Como consequência da Hipótese Ergódica, o tempo Δt que o sistema permanece em um pequeno volume ΔV do Espaço de Fase é proporcional ao volume total V do Espaço de Fase [1],

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\Delta t}{t} = \frac{\Delta V}{V}.$$

Na perspectiva de Boltzmann, se a trajetória do sistema passar um número igual de vezes em cada ponto do Espaço de Fase energeticamente disponível, dado pela densidade $\varrho(q, p)$, temos $\langle G \rangle = \langle G \rangle$. Note a validade da Hipótese Ergódica mesmo se a trajetória passar uma vez só em cada ponto do Espaço de Fase acessível. Um exemplo disto é o Oscilador Harmônico Simples Unidimensional: sendo a energia total E a única constante de movimento, isto define uma superfície de energia unidimensional em um Espaço de Fase bidimensional; então, em cada período de oscilação, a trajetória passa uma vez em todos os pontos da superfície de energia [47–50] (veja os detalhes no **Apêndice A**). Assim, temos um sistema integrável e ergódico. Outros sistemas unidimensionais semelhantes, como a Partícula em uma Caixa Unidimensional, são ditos sistemas trivialmente ergódicos.

No entanto, a Hipótese Ergódica não se verifica, em geral, para sistemas físicos multidimensionais [48], pois a trajetória não passará por todos os pontos do Espaço de Fase acessível, seja por causa da unicidade das soluções das equações de Hamilton, seja porque o mapeamento de um intervalo de tempo unidimensional em um elemento de superfície N -dimensional não é unívoca. O Oscilador Harmônico Simples Bidimensional (**Apêndice A**) é um caso clássico na literatura de um sistema que não é ergódico quando a relação entre as frequências de cada grau de liberdade for racional, e ergódico quando essa relação for irracional [51]. Para esses casos, usa-se uma versão mais fraca da Hipótese Ergódica, a Hipótese Quase-Ergódica, a qual estabelece que basta a trajetória passar suficientemente próxima de qualquer ponto do Espaço de Fase para que $\langle G \rangle = \langle G \rangle$.

G. Birkhoff e J. von Neumann nos anos 1930 apresentaram dois teoremas que provam

as hipóteses ergódica e quase-ergódica [16, 18], partindo-se da ideia de medida invariante em relação a uma dinâmica dada por um fluxo $\varphi^t \mathbf{x}$, que é uma família de trajetórias \mathbf{x} em um instante de tempo t [52, 53]. Para enunciarmos esses teoremas, antes precisamos definir alguns conceitos preliminares. Medida é uma abstração matemática a respeito do tamanho de um conjunto. Em particular, a medida de Lebesgue generaliza a noção de comprimento, área, volume, densidade e probabilidade. Assim, a medida de Lebesgue μ de um intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$ é simplesmente o seu comprimento, $\mu([a, b]) = b - a$. Outra noção importante é o de conjunto de medida nula: um conjunto C tem medida nula quando $\mu(C) = 0$. Então, no intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$, o conjunto de números racionais tem medida nula, pois é um conjunto de “tamanho” desprezível quando comparado com o conjunto de números irracionais nesse intervalo, que é igual ao seu comprimento. Outra interpretação muito usada para a medida é a probabilística: para um conjunto qualquer C , se definirmos $\mu(C) = 1$, temos uma medida de probabilidade; então, para um conjunto $B \subset C$, a medida $\mu(B)$ é a probabilidade de ocorrência do evento relativo a B .

Considere $\mathbf{x} \in \mathbb{P}$ e o fluxo $\varphi^t : \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{P}$ correspondendo à solução de um sistema dinâmico tal que $\varphi^t \mathbf{x} \equiv \mathbf{x}(t)$; então, uma medida é invariante em relação a uma dinâmica dada por um fluxo φ^t se, e só se, $\mu(\varphi^t(A)) = \mu(A)$ ⁽²⁾, para qualquer $t \in \mathbb{R}$ e $\mathbf{x}(t) \in A \subset \mathbb{P}$. Assumindo, por conveniência, que $\mu(\mathbb{P}) = 1$, podemos definir medida ergódica:

Medida ergódica é uma medida invariante em relação a uma dinâmica φ^t tal que $\mu(A) = 0$ ou $\mu(A) = 1$, contanto que $\varphi^t(A) = A$, para todo $\emptyset \neq A \subset \mathbb{P}$.

A medida invariante corresponde à descrição mecânico-estatística ao estado de equilíbrio macroscópico e à preservação do volume do Espaço de Fase, condição assumida inicialmente para o elo micro-macro. Agora, a medida nula corresponde a eventos de probabilidade desprezível e, portanto, a eventos atípicos do sistema. Assim, um sistema dinâmico exibe ergodicidade se a única medida é a total $\mu(A) = 1$; isto é, *um sistema é ergódico se o Espaço de Fase for indecomponível em relação ao fluxo φ^t e a medida μ* . É esta a ideia de o Espaço de Fase não ter mais de um conjunto de medida invariante não-trivial que se deduz a Hipótese Ergódica:

Teorema Ergódico Pontual de Birkhoff: Seja μ uma medida invariante para o fluxo φ^t e $\mathbf{x} \in \mathbb{P}$. Se $f : \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{R}$ for integrável, então:

(a) Para quase toda medida μ , existe uma $\langle f \rangle$ integrável tal que

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t f(\varphi^s \mathbf{x}) ds;$$

²Na literatura matemática usa-se, ao invés, $\varphi^{-t}(A)$ na definição de medida invariante para informar que $\varphi^t(A)$ é invertível.

(b) Para quase toda medida μ , $\langle f \rangle$ é uma constante em relação à dinâmica,

$$\langle f(\varphi^t \mathbf{x}) \rangle = \langle f(\mathbf{x}) \rangle;$$

(c) As médias temporal e espacial são,

$$\int_{\mathbb{P}} \langle f(\mathbf{x}) \rangle d\mu(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{P}} f(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}).$$

O Teorema Pontual de Birkhoff conduz à igualdade entre as médias temporal e espacial na perspectiva de Boltzmann, exceto para subconjuntos do Espaço de Fase de medida nula (“quase para toda medida μ ”). De fato, a condição da medida ser invariante garante a determinação da média temporal de qualquer quantidade física $f(\mathbf{x})$ (a), a sua independência em relação à (b) e a preservação do volume total do Espaço de Fase (c); logo, se $\langle f(\mathbf{x}) \rangle$ for uma função constante em relação à medida, segue-se a igualdade entre a média temporal e espacial

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\mathbb{P}} f(\mathbf{x}') d\mu(\mathbf{x}'), \quad (2.16)$$

em que $\int_{\mathbb{P}} d\mu(\mathbf{x}) = \mu(\mathbb{P})$. Portanto, o fluxo φ^t e a medida μ são ergódicos. Então, comparando com a Eq. (2.15), identificamos a medida com a densidade e elemento de volume do Espaço de Fase, $d\mu(\mathbf{x}) \equiv \varrho(q, p) dq dp$.

O Teorema de von Neumann prova a Hipótese Quase-Ergódica:

Teorema Ergódico Médio de von Neumann: Seja $f : \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função quadrado integrável $|f|^2$, μ uma medida invariante para o fluxo φ^t e $\mathbf{x} \in \mathbb{P}$. Então, existe uma função $\tilde{f} : \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{R}$ de modo que $|\tilde{f}|^2$ é integrável e

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{P}} \left| \frac{1}{t} \int_0^t f(\varphi^s \mathbf{x}) ds - \tilde{f}(\mathbf{x}) \right|^2 d\mu(\mathbf{x}) = 0.$$

Os teoremas acima valem igualmente para sistemas discretos, bastando-se substituir a média temporal contínua pela discreta,

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f(\varphi^n \mathbf{x}). \quad (2.17)$$

Ao contrário do Teorema de Birkhoff, o enunciado de von Neumann não impõe a existência da média temporal para quase todos os pontos do Espaço de Fase, mas à sua existência assintoticamente. Isto significa que, para um sistema ser ergódico, basta que

exista a igualdade média temporal-média espacial para trajetórias passando arbitrariamente próximas de qualquer ponto do Espaço de Fase. Como consequência de condições menos restritivas, inclui-se como sistemas ergódicos aqueles com mais de 1 grau de liberdade.

Os resultados rigorosos desses teoremas oferecem, em princípio, uma forma de se investigar ergodicidade em um sistema sem recorrer diretamente às médias temporal e espacial, bastando reconhecer a medida invariante apropriada. Aliás, essa abordagem deixa clara que a caracterização de ergodicidade só faz sentido especificando-se uma **dinâmica** e uma **medida invariante**. Do ponto de vista físico, isto significa que um sistema é ergódico em relação a uma superfície definida por uma constante de movimento, podendo ser não-ergódico em uma outra superfície de energia do Espaço de Fase [54].

Há outras propriedades dinâmicas mais fortes que a ergodicidade [43, 47], como o *mixing* ⁽³⁾, mistura ou mesclagem, caracterizado qualitativamente pela uniformização de pontos no Espaço de Fase e por não apresentar divergência exponencial de trajetórias próximas, como ocorre para sistemas usualmente caóticos; portanto, mesclagem é uma propriedade mais fraca que caos. Deve-se destacar que um sistema dinâmico pode apresentar mais de uma propriedade dinâmica. Em nosso caso específico, um sistema caótico é também mesclado e ergódico, mas não reciprocamente [43].

Apelamos para a ideia de medida como generalização de volume e a um exemplo intuitivo para se definir mesclagem [55]: considere um copo de vidro contendo um volume $\mu(A)$ de água na qual acrescentamos um volume $\mu(B)$ de tinta preta; então, a concentração de tinta no copo pode ser estimado por $\mu(B)/\mu(C)$, em que $\mu(C) = \mu(A) + \mu(B)$ é o volume total ocupado pela água e a tinta no copo. Para se ter uma mistura homogênea de água e tinta, devemos agitá-la por um tempo n . Definindo $\varphi^n B$ como a região ocupada pela tinta após ser agitada por um tempo n e R uma região qualquer da mistura, a concentração $\mu(B)/\mu(C)$ é homogênea desde que ela seja tanto em relação ao volume total, quanto ao volume de qualquer região $\mu(R)$ no tempo assintótico,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu(\varphi^n B \cap R)}{\mu(R)} = \frac{\mu(B)}{\mu(C)}.$$

Para um volume total unitário, $\mu(C) = 1$, temos a definição formal de mesclagem

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu(\varphi^n B \cap R) = \mu(B)\mu(R). \quad (2.18)$$

³Na literatura [54] há uma subclassificação de *mixing* em *mixing* fraco, assemelhando-se mais a ergodicidade, e *mixing* forte. Em vista de nossos propósitos, não fazemos aqui esta distinção.

Esta definição mostra que as medidas dos conjuntos B e R tendem a ser independentes com o passar do tempo, condizendo com a intuição de mistura homogênea perfeita. Partindo-se do Teorema Ergódico de Birkhoff [56], a ergodicidade pode ser expressa similarmente à Eq. (2.18)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \mu(\varphi^k B \cap R) = \mu(B)\mu(R). \quad (2.19)$$

A principal diferença da ergodicidade com a mesclagem é a independência entre as medidas dos conjuntos ser um resultado médio. Essas definições conduzem à interpretação em termos de imprevisibilidade dinâmica, segundo a proposta de Joseph Berkovitz [54] para caracterizar precisamente a hierarquia de aleatoriedade ou ergodicidade de sistemas dinâmicos [43, 47]. Uma das noções subjacentes a essa imprevisibilidade refere-se à correlação probabilística $C(B, A)$ entre dois conjuntos mensuráveis A e B quaisquer, definidas por

$$C(B, A) = \mu(A \cap B) - \mu(A)\mu(B), \quad (2.20)$$

sendo $C(B, A) = 0$ para A e B descorrelacionados. Então, comparando as Eqs. (2.20) e (2.19), concluímos que sistemas ergódicos são aqueles onde os estados dinâmicos mantêm-se correlacionados por todo o tempo, pois a descorrelação é uma quantidade média, de modo a não haver efetivamente um decaimento de correlação; portanto, em sistemas ergódicos a relação causa-efeito é permanente e a imprevisibilidade é nula; isso explica porque um sistema integrável pode ser ergódico, como acontece para sistemas hamiltonianos unidimensionais. Na comparação das Eqs. (2.20) e (2.18), vemos que em sistemas mesclados ocorre efetivamente um decaimento de correlação entre dois estados dinâmicos no decorrer do tempo, de modo que a relação causa-efeito se exauri e a imprevisibilidade ocorre assintoticamente no tempo. Em sistemas caóticos, o decaimento de correlação entre estados dinâmicos tende a ocorrer para um tempo finito e, por conseguinte, um determinado estado dinâmico tende a ser independente a algum outro estado em um instante de tempo anterior. A situação extrema acontece para sistemas de Bernoulli, no qual estados adjacentes são independentes entre si em qualquer instante [54].

O decaimento de correlação reflete-se na condição de equilíbrio de um sistema. Para um sistema fora de equilíbrio, se ele for ergódico, jamais ele alcançará um estado de equilíbrio, por causa da manutenção da correlação de seus estados dinâmicos. O oscilador harmônico simples é exemplo disso [57]: a evolução de qualquer distribuição de probabilidade a ele associado e que não seja constante, não convergirá para nenhum estado de equilíbrio. Logo, ergodicidade é insuficiente para um sistema fora do equilíbrio convergir ao equilíbrio. Porém, devido ao decaimento de correlação, a mesclagem é suficiente para

o sistema inicialmente fora de equilíbrio convergir a um estado de equilíbrio. Em [58], estima-se o tempo de relaxação da distribuição de probabilidade.

2.5 Bilhares

Bilhar é um sistema dinâmico consistindo de uma região geométrica plana contendo uma partícula em movimento livre, intercalado por reflexões especulares quando ela atinge a fronteira geométrica. Essa definição abrange diversos casos comumente encontrados na literatura, como os bilhares de Bunimovich, de Sinai, poligonais, etc. Porém, há diversos sistemas dinâmicos considerados como um bilhar que não satisfazem a definição anterior. Para citar alguns, temos:

bilhares externos ou duais [59]: a partícula é externa à região geométrica;

bilhares generalizados [60]: bilhares com regiões geométricas multidimensionais ou com lei de reflexão generalizada (reflexão não especular da partícula na fronteira geométrica);

bilhares não-euclidianos [61]: a região geométrica é não-euclidiana;

regiões geométricas confinantes de mais de 1 partícula [62–66].

É comum também se referir à partícula como “bilhar” e à região geométrica, como “mesa de bilhar”; assim, diz-se “bilhar na elipse”, “bilhar no polígono”, etc. De qualquer forma, todas essas noções compartilham a característica de haver uma partícula interagindo com algum objeto geométrico e, como é um campo de pesquisa em desenvolvimento, não há ainda uma definição geral satisfatória conciliando aspectos teóricos e aplicados.

O uso de bilhares apareceu como um sistema protótipo eficiente na investigação de propriedades dinâmicas tanto para sistemas físicos com grande número de partículas (bilhar de Sinai para gases), quanto para aqueles com uma dinâmica não trivial (bilhares convexos de Birkhoff para o problema de 3 corpos), pois permitem a exploração detalhada do sistema original, em vista de sua representação simples, e a manutenção das características responsáveis pela regularidade (integrabilidade) ou irregularidade (ergodicidade e caos) dinâmica do sistema original. Atualmente se usa dessas vantagens na investigação física mesoscópica (descrição física em uma escala intermediária entre o tamanho atômico e o micrométrico). A Fig. 2.4 mostra algumas formas geométricas de bilhares.

Em bilhares integráveis, as trajetórias não se dispersam nas sucessivas colisões com as fronteiras geométricas. A isto chama-se mecanismo focalizador. Bilhares com esse mecanismo são, por exemplo, os elípticos e os retangulares. Mas, muitos bilhares apresentam dinâmica caótica, como o bilhar de Hadamard (1898), consistindo de uma partícula

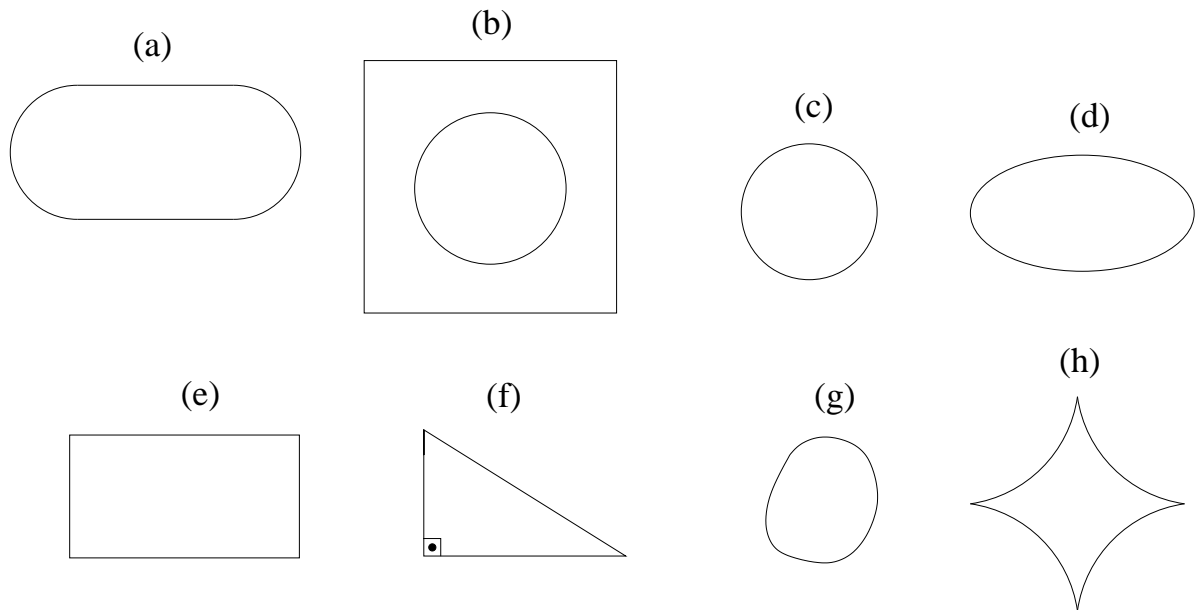


Figura 2.4: Exemplos de algumas formas geométricas de bilhares: (a) Estádio; (b) Sinai; (c) circular; (d) elíptico; (e) retangular; (f) triângulo retângulo; (g) convexo qualquer; (h) côncavo qualquer.

movendo-se sobre uma superfície de curvatura constante negativa, ou o bilhar de Artin (1924), também uma partícula movendo-se em uma superfície de curvatura negativa com uma cúspide. No entanto, o bilhar de Sinai (1970) é o mais representativo fisicamente por mostrar a validade da Hipótese Ergódica para um sistema com poucas partículas. Ele consiste de uma partícula em um quadrado do qual retirou-se uma região circular central. Então, a partícula colide com as paredes do quadrado e com a superfície externa do círculo. A ergodicidade e o caos emergem em decorrência do efeito dispersivo sobre a trajetória da partícula em cada colisão com o círculo, combinado com a ausência desse efeito nas colisões com as paredes do quadrado. Este bilhar surgiu reduzindo-se o sistema para 2 partículas colidindo entre si em um toro \mathbb{T}^2 , situação esta representada em seguida em uma “mesa quadrada”, onde se fixou a posição de uma das partículas [67]. Na década de 1970, Leonid A. Bunimovich descobriu outro mecanismo gerador de comportamento caótico, a desfocalização, observado em um bilhar com a forma de um estádio, o bilhar de Bunimovich. Ele é obtido pela separação do bilhar circular em duas metades, ligadas por dois segmentos de reta. Nesses sistemas, coexistem os efeitos de dispersão e focalização de trajetórias, e a desfocalização é o resultado do predomínio da dispersão sobre a focalização [68]. Nesses casos com ergodicidade e caos, as trajetórias preenchem todo o bilhar, o que não acontece no caso de bilhares integráveis.

Há ainda os bilhares poligonais, que apresentam um comportamento dinâmico intermediário entre o regular e o caótico, o pseudocaos. São caracterizados por apresentarem

expoente de Lyapunov nulo, divergência polinomial de trajetórias vizinhas [69] e ergodicidade nos bilhares poligonais típicos [70, 71]. Isto implica a ausência de ergodicidade em bilhares poligonais racionais (bilhares cujos ângulos internos são comensuráveis com π), pois há apenas um número finito de direções possíveis que a partícula pode se mover no bilhar. Os bilhares poligonais racionais são bastante estudados na literatura e servem, por exemplo, como recurso de aproximação para se entender a dinâmica em bilhares poligonais irracionais, pois a maioria não é integrável. Tratem os brevemente dos polígonos racionais.

Considere um polígono racional com ângulos internos $\theta_i = \frac{m_i}{n_i}\pi$, com m_i e n_i inteiros positivos coprimos ($i = 1, \dots, p$) e $\mathcal{N} = \text{mmc}(n_1, \dots, n_p)$; o conjunto de direções finitas possíveis formam um grupo finito, denominado Grupo Dedral $\mathcal{D}_{2\mathcal{N}}$ (**Apêndice B**). Isso significa que cada direção da partícula corresponde a uma posição na circunferência unitária, e cada reflexão da partícula com um dos lados do bilhar corresponde a ação do grupo sobre essa direção. As direções possíveis dividem o círculo unitário em $2\mathcal{N}$ superfícies invariantes de ângulos $\frac{\pi}{\mathcal{N}}$, as quais formam a superfície \mathcal{S} através do método de desdobramento de polígonos ⁽⁴⁾[72]. Essa superfície é caracterizada pelo genus topológico [31, 73]

$$g(\mathcal{S}) = 1 + \frac{\mathcal{N}}{2} \sum_{i=1}^p \frac{m_i - 1}{n_i}. \quad (2.21)$$

Para $g(\mathcal{S}) = 1$, a superfície é um toro \mathbb{T}^2 ; isto ocorre apenas para os ângulos internos com $m_i = 1$, e os únicos bilhares poligonais sob essa condição são o retângulo, o triângulo equilátero, o triângulo retângulo isósceles e o triângulo retângulo com ângulo agudo $\frac{\pi}{6}$. E para $g(\mathcal{S}) > 1$, a superfície assemelha-se a vários toros “grudados”, sendo o genus correspondendo ao número de “buracos” dessa superfície. Esta “fusão” de toros geram pontos de sela responsáveis pela instabilidade na trajetória da partícula.

Como mencionado anteriormente, bilhares poligonais racionais não são ergódicos. Isso significa que o Espaço de Fase é decomponível em relação ao fluxo φ^t e medida μ . Essa decomposição é segundo fluxos φ_θ^t associados a cada direção $\theta \in [0, \frac{\pi}{\mathcal{N}}]$, os quais são unicamente ergódicos ⁽⁵⁾ e, por conseguinte, ergódico. Quando a direção θ é racional, temos um conjunto de medida nula; então, a ergodicidade do fluxo φ_θ^t é garantida para as direções θ irracionais [31, 32, 70, 71]. À primeira vista, parece haver uma contradição entre o fato de bilhares poligonais racionais serem não ergódicos, com fluxos ergódicos; no entanto, pela definição de fluxo, φ_θ^t é a família de trajetórias correspondendo a todas as

⁴Desdobramento de polígonos consiste em refletir o polígono, e não a trajetória da partícula, em relação ao lado de incidência da partícula. Logo, a direção inicial da trajetória da partícula é mantida.

⁵Isto significa que o fluxo possui uma única medida invariante, o que garante a convergência uniforme das médias temporais no Teorema Ergódico Pontual de Birkhoff [56, 74].

posições possíveis para um instante t e direção θ fixos, ou seja, para cada t e direção θ , os subespaços correspondentes são plenamente acessados por todas as trajetórias possíveis, e isto não contradiz o fato de os bilhares poligonais racionais serem não-ergódicos, pois uma única trajetória é incapaz de acessar todo o Espaço de Fase.

O Sistema de Interesse e Resultados Numéricos Preliminares

3.1 Sistema de 2 Partículas em um Intervalo Finito

O sistema mecânico de 2 partículas interagindo por colisões elásticas confinadas em um intervalo finito unidimensional, Fig. 3.1(a), é um sistema simples que exibe uma dinâmica regular ou irregular de acordo com a razão das massas $\gamma = \frac{m_2}{m_1}$ das partículas. Vamos nos referir a estas partículas como partícula **1** (direita) e partícula **2** (esquerda). Este sistema equivale ao bilhar triângulo retângulo [29], Fig. 3.1(b). Verifiquemos esta equivalência em duas partes:

Espaço de Configuração: o Espaço de Configuração \mathbb{C}^2 do sistema corresponde à região em forma de triângulo retângulo isósceles, Fig. 3.2(a), pois:

- a posição de cada partícula $q_i \in [0, L]$, com L o comprimento do intervalo e $i = 1, 2$;
- as partículas são impenetráveis, $0 \leq q_1 \leq q_2 \leq L$;
- as partículas colidem entre si em $q_1 = q_2$;
- as colisões das partículas **1** e **2** com as paredes ocorrem em $(0, q_2)$ e (q_1, L) , respectivamente.

Definindo $L = 1$ e $q_i = \frac{x_i}{\sqrt{m_i}}$, transformamos o Espaço de Configuração \mathbb{C}^2 em $\widehat{\mathbb{C}}^2$ (Fig. 3.2(b)), em que $0 \leq x_i \leq \sqrt{m_i}$, com $x_1 \leq \sqrt{\gamma} x_2$, de modo que $\widehat{\mathbb{C}}^2$ seja um triângulo retângulo com ângulo ζ tal que $\text{tg}^2 \zeta = \gamma$, com $\zeta \in (0, \frac{\pi}{2})$.

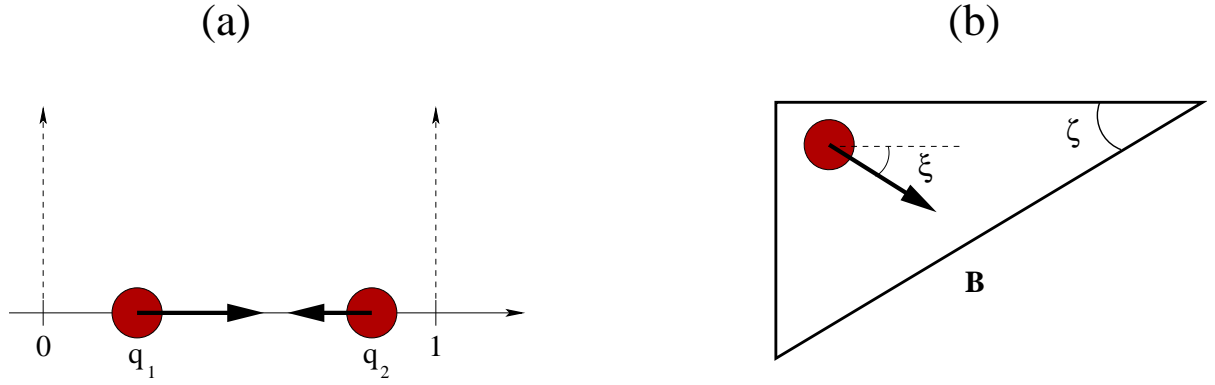


Figura 3.1: (a) Sistema de 2 partículas confinadas em um intervalo $[0, 1]$. (b) Bilhar triângulo retângulo com ângulo agudo ζ e $\text{tg} \zeta = \frac{w_2}{w_1}$, em que w_i são as velocidades normalizadas.

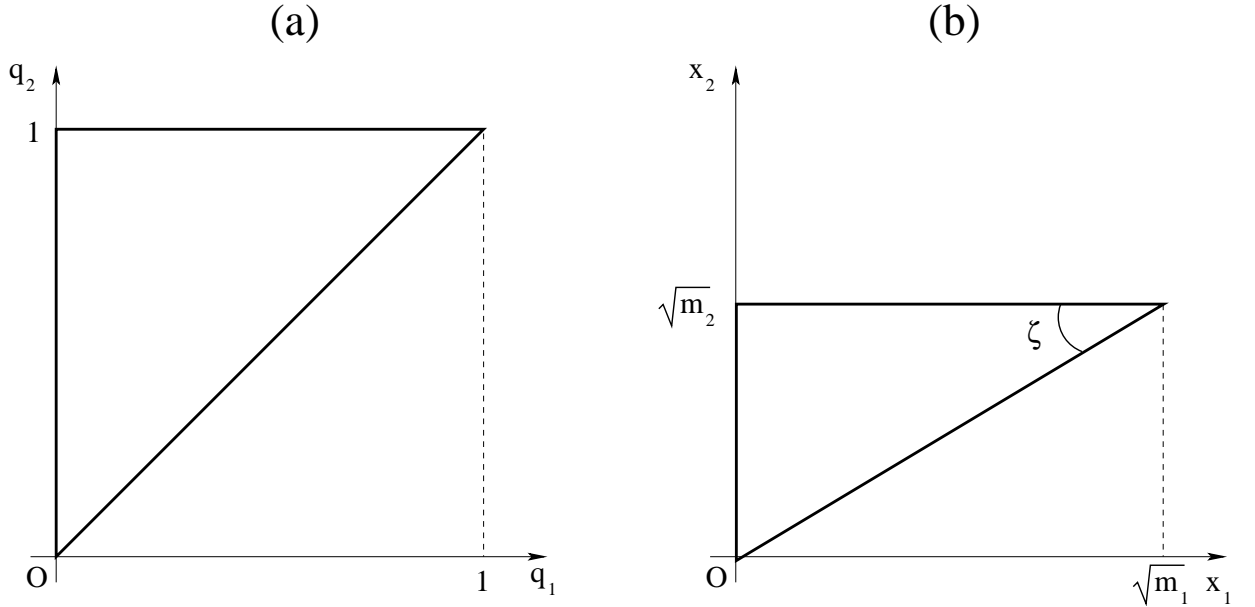


Figura 3.2: (a) Espaço de Configuração segundo as posições q_i . (b) Espaço de Configuração segundo as posições x_i .

Espaço de Momentos ou Velocidades: o hamiltoniano do sistema é [75]

$$\mathcal{H}(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V_0[\delta(q_1) + \delta(q_1 - q_2) + \delta(q_2 - 1)], \quad (3.1)$$

com $V_0 \rightarrow \infty$ (para garantir a impenetrabilidade das partículas entre si e com as paredes) e $\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = E$. As deltas de Dirac são usadas para descrever as colisões entre as duas partículas e entre uma das partículas com uma das paredes. Sendo $p_i = m_i v_i$, isso equivale a

$$\frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2} = E, \quad V(q_1, q_2) = \begin{cases} 0, & \text{para } q_1 > 0, q_2 < 1, q_1 \neq q_2 \\ \infty, & \text{para } q_1 \leq 0, q_2 \geq 1, q_1 = q_2 \end{cases}. \quad (3.2)$$

Usando a transformação canônica $x_i = q_i\sqrt{m_i}$ e $P_i = \frac{p_i}{\sqrt{2m_iE}}$, o novo hamiltoniano é

$$\mathcal{K}(x_1, x_2, P_1, P_2) = P_1^2 + P_2^2 + \mathcal{V}_0[\sqrt{m_1}\delta(x_1) + \sqrt{m_2}\delta(x_1\sqrt{\gamma} - x_2) + \sqrt{m_2}\delta(x_2 - \sqrt{m_2})], \quad (3.3)$$

em que $P_1^2 + P_2^2 = 1$ e $\mathcal{V}_0 = \frac{V_0}{E}$. Assim, $\mathcal{K}(x_1, x_2, P_1, P_2)$ é o hamiltoniano de uma partícula de momento (ou velocidade) e massa unitárias movendo-se em um bilhar triângulo retângulo de lados $x_1 = 0$ e $x_2 = \sqrt{\gamma}x_1$ e $x_2 = \sqrt{m_2}$, (Fig. 3.1). Isto equivale a

$$w_1^2 + w_2^2 = 1, \quad \mathcal{V}(x) = \begin{cases} 0, & x \in \mathbf{B} \\ \infty, & x \notin \mathbf{B} \end{cases}, \quad (3.4)$$

para $\mathcal{K}(x_1, x_2, P_1, P_2)$ e \mathbf{B} a fronteira do bilhar triângulo retângulo. Como são adimensionais, $w_i = P_i$ e referir-nos-emos aos w_i como velocidades normalizadas. Tais velocidades correspondem a direção ξ da partícula no bilhar, Fig. 3.1(b), tal que $\tan \xi = \frac{w_2}{w_1}$.

Observamos, então, que as transformações canônicas transformam o espaço dos momentos ou velocidades, uma elipse, em um espaço de velocidades normalizadas, uma circunferência \mathbb{S}^1 . Este resultado permite, como vimos no caso do Oscilador Harmônico Simples (**Apêndice A**), considerar as velocidades das partículas como um número complexo, facilitando a interpretação das colisões das partículas, como veremos abaixo.

Em nosso sistema de 2 partículas, a conservação da energia total nada mais é que a conservação da energia cinética total; além disso, em cada colisão entre as partículas, o momento total é conservado também. Essas duas quantidades conservadas nos fornecem as velocidades das partículas depois da colisão, v_{id} , em função das velocidades antes, v_{ia} [76], cuja equação matricial é

$$\begin{bmatrix} v_{1d} \\ v_{2d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1-\gamma}{1+\gamma} & \frac{2\gamma}{1+\gamma} \\ \frac{2}{1+\gamma} & \frac{\gamma-1}{1+\gamma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1a} \\ v_{2a} \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Da conservação da energia, definimos $v_i = \sqrt{2m_i^{-1}E}w_i$; substituindo-o na equação matricial acima, obtemos uma equação matricial das velocidades pós-colisão (w_{1d}, w_{2d}) como uma reflexão anti-horária por um ângulo θ das velocidades (w_{1a}, w_{2a}) pré-colisão,

$$\begin{bmatrix} w_{1d} \\ w_{2d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{1a} \\ w_{2a} \end{bmatrix}, \quad (3.6)$$

com $\cos \theta = \frac{1-\gamma}{1+\gamma}$; ou seja, o estado depois da colisão entre as partículas é obtido a partir de um estado (w_{1a}, w_{2a}), Fig. 3.3(a), refletido em relação ao eixo w_1 , Fig. 3.3(b), seguido por uma rotação anti-horária por um ângulo θ , Fig. 3.3(c). A Eq. (3.6) pode ser re-

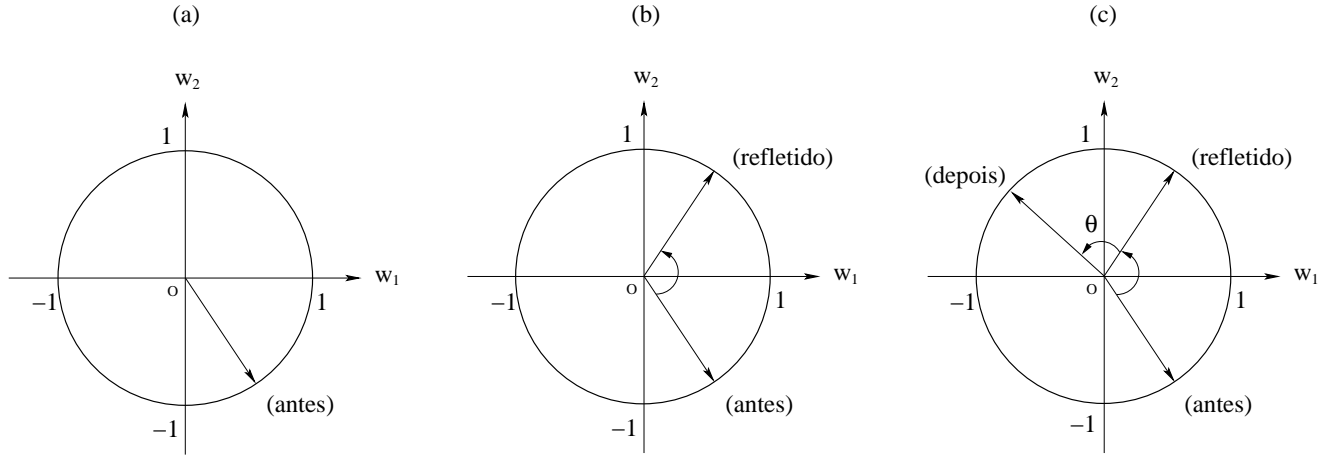


Figura 3.3: Interpretação ilustrativa da Eq. (3.6): a partir de um estado inicial (w_{1a}, w_{2a}) (a), o estado após a colisão corresponde a uma reflexão desse estado em relação ao eixo w_1 (b) seguida por uma rotação por um ângulo θ (c).

expressada como uma rotação anti-horária por um ângulo θ das velocidades $(w_{1a}, -w_{2a})$ pré-colisão,

$$\begin{bmatrix} w_{1d} \\ w_{2d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{1a} \\ -w_{2a} \end{bmatrix}. \quad (3.7)$$

Como o plano real e o conjunto dos números complexos são espaços vetoriais isomorfos [77], a Eq. (3.7) equivale a

$$z_d = e^{i\theta} \overline{z_a}, \quad (3.8)$$

em que $z_a = w_{1a} + iw_{2a}$, $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$, $z_d = w_{1d} + iw_{2d}$ e a barra sobre o número complexo denota a conjugação complexa. Adotamos a notação complexa por ser mais simples e versátil que a matricial.

Como em nosso sistema as partículas estão confinadas no intervalo $[0, 1]$, as partículas colidem com as paredes. A sua descrição complexa é:

$$z_d = -\overline{z_a} = -w_{1a} + iw_{2a}, \quad (3.9)$$

a **1** colide com a parede;

$$z_d = \overline{z_a} = w_{1a} - iw_{2a}, \quad (3.10)$$

a **2** colide com a parede;

$$z_d = -z_a = -w_{1a} - iw_{2a}, \quad (3.11)$$

1 e **2** colidem com as paredes.

Denominamos de *estado* [26] tanto o par de velocidades, normalizadas ou não, quanto o número complexo representante das velocidades normalizadas.

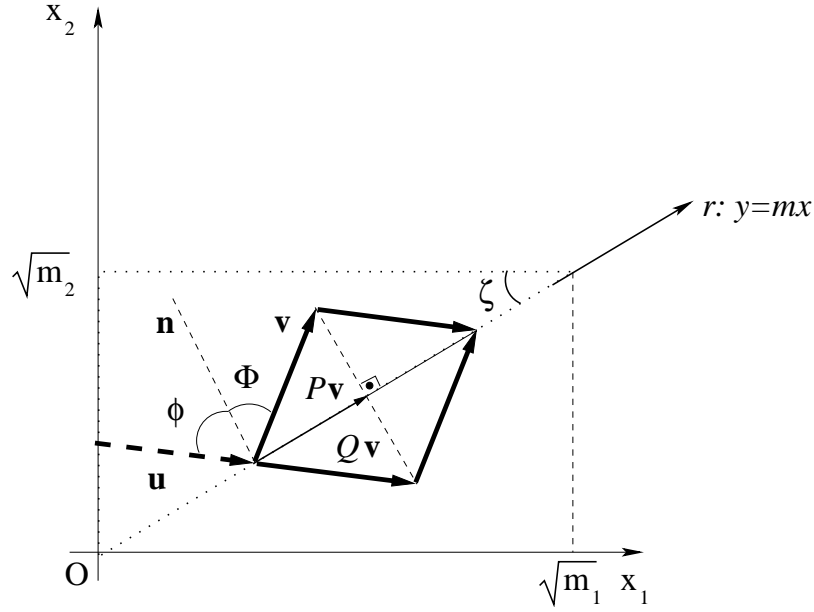


Figura 3.4: Uma partícula incide na hipotenusa de um bilhar triângulo retângulo em um ângulo ϕ em relação ao vetor normal \mathbf{n} com uma velocidade unitária \mathbf{u} e é refletida especularmente com velocidade unitária \mathbf{v} em um ângulo Φ . Isto equivale à colisão elástica entre 2 partículas em um intervalo finito.

A relação entre γ e θ , $\cos \theta = \frac{1-\gamma}{1+\gamma}$, pode ser simplificada expressando-se γ em função de θ e considerando-se as relações trigonométricas $\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1-\cos \theta}{2}$ e $\cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1+\cos \theta}{2}$. Isto resulta em

$$\gamma = \operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2}, \quad \text{com } \theta \in (0, \pi). \quad (3.12)$$

Mas, como a razão das massas no bilhar é $\gamma = \operatorname{tg}^2 \zeta$, identificamos $\zeta = \frac{\theta}{2}$. Obtemos, enfim, o último elo entre o sistema de 2 partículas em um intervalo finito e o bilhar triângulo retângulo. Deste resultado, a Eq. (3.5) conduz à reflexão especular pela partícula na hipotenusa do bilhar. De fato, sendo

$$\cos \theta = \frac{1 - \operatorname{tg}^2 \zeta}{1 + \operatorname{tg}^2 \zeta}, \quad m = \operatorname{tg} \zeta, \quad \mathbf{v} = (w_{1d}, w_{2d}), \quad \mathbf{u} = (w_{1a}, w_{2a}),$$

$$P = \begin{bmatrix} \frac{1}{1+m^2} & \frac{m}{1+m^2} \\ \frac{m}{1+m^2} & \frac{1}{1+m^2} \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{bmatrix} \frac{1-m^2}{1+m^2} & \frac{2m}{1+m^2} \\ \frac{2m}{1+m^2} & \frac{m^2-1}{1+m^2} \end{bmatrix},$$

a Eq. (3.5) equivale a $Q\mathbf{v} = 2P\mathbf{v} - \mathbf{v}$ (ver Fig. 3.4), que é a equação matricial de reflexão em torno da reta $y = mx$, em que P é a matriz da projeção ortogonal sobre a reta r de equação $y = mx$ [78]. Isso implica que o ângulo do vetor $Q\mathbf{v}$ em relação à reta r é igual ao ângulo do vetor \mathbf{v} da velocidade refletida; mas $Q\mathbf{v}$ é apenas o vetor \mathbf{u} da velocidade incidente da partícula na hipotenusa do bilhar. Portanto, os ângulos $\Phi = \phi$, e a reflexão

é especular.

A reflexão nos catetos do triângulo retângulo, que é especular também, é um caso particular da reflexão na hipotenusa.

Como apontado por G. Manfredi e colaboradores [75], a generalização para sistemas com N partículas confinadas em um intervalo unidimensional pode ser representado por uma única partícula em um N -simplex, que é a generalização N -dimensional de triângulo ⁽¹⁾. Assim, por exemplo, para um sistema com 3 partículas no intervalo $[0, 1]$, o bilhar equivalente é um tetraedro de arestas $\sqrt{m_i}$. Por isso, entendemos que a ideia original subjacente aos bilhares reside como um artifício simplificador na descrição de sistemas físicos com várias partículas: as N partículas interagentes são substituídas por uma região N -dimensional contendo uma única partícula, de modo que a geometria dessa região, o bilhar, reflita o tipo de interação entre as partículas da representação original. Esta definição vai além da definição alternativa de bilhar, anteriormente mencionada, como um sistema confinador de partículas.

No caso, por exemplo, de 2 partículas interagentes via potencial de Yukawa sujeitas a um campo magnético fraco em uma região circular [66], acreditamos que exista um bilhar no sentido acima definido, mas, como a interação não é trivial, a geometria desse suposto bilhar deve ser também bastante complicada. Por outro lado, de um ponto de vista experimental, se justifica a definição de bilhar como um sistema confinador de partículas, pois nem é possível se construir e nem se visualizar um bilhar de dimensão qualquer. Talvez fosse interessante distinguir as duas concepções de bilhar, como *bilhar matemático* ou *abstrato* para o sentido de uma única partícula confinada em uma região N -dimensional, deixando o termo bilhar para sistemas confinadores ou, ainda, manter o termo bilhar na concepção abstrata e denominar os sistemas confinadores de partículas como *bilhar físico*.

Nas próximas seções apresentaremos vários resultados numéricos preliminares para exemplificar as características conhecidas desse sistema. Assim, para 2 partículas pontuais com massas quaisquer no intervalo $[0, 1]$, e seguindo a dinâmica já exposta para as mesmas, primeiro faremos algumas considerações e introduziremos algumas definições importantes para a análise. Posteriormente, discutiremos resultados obtidos de simulações numéricas. Os detalhes dos estudos analíticos da dinâmica das partículas serão apresentados no Capítulo 4.

¹0-simplex é um ponto; 1-simplex é um segmento de reta; 2-simplex é um triângulo; 3-simplex é um tetraedro.

3.2 Considerações Preliminares

Em um sistema de 2 partículas de massas arbitrárias em um intervalo finito $[0, L]$ (poço de potencial infinito) ocorrem colisões partícula-partícula (p-p) e partícula-parede (p-w). No primeiro caso, a mudança de velocidades é dada pela Eq. (3.5). Já para o segundo, a partícula simplesmente troca o sinal de sua velocidade. A exata sequência de colisões p-p e p-w ao longo da dinâmica vai depender dos valores da razão das massas e das posições e velocidades iniciais das partículas. Entre duas colisões quaisquer, as partículas movem-se com velocidade constante. Para simular esse sistema, arbitramos os valores das massas m_1 e m_2 , da posição inicial de colisão $x_c(1)$ e das velocidades iniciais $v_1(1)$ e $v_2(1)$ das partículas. Em particular, os valores dessas velocidades são escolhidos como se as partículas tivessem saído de uma colisão: se assumirmos que as partículas movem-se em sentidos opostos, os valores das velocidades iniciais podem ser quaisquer, contanto que $v_1(1) < 0$ e $v_2(1) > 0$; mas, se assumirmos que as partículas deslocam-se no mesmo sentido, as velocidades iniciais devem ser escolhidas de modo que $v_1(1) < v_2(1)$. Isto garante que, se as partículas deslocam-se para a direita, a partícula **1** é mais lenta que a **2**; e, se elas deslocam-se para a esquerda, a **2** é mais lenta que a **1**.

Em seguida, determinamos o tempo que cada partícula demora para chegar à parede (extremidade do intervalo finito $[0, L]$) a partir da posição de colisão inicial. Isto permite saber qual partícula chega antes à parede. Consideremos separadamente as duas situações mencionadas anteriormente:

- **as partículas deslocam-se em sentidos opostos:** há duas possibilidades:
 - *as partículas chegam às paredes simultaneamente:* os sinais das velocidades das partículas são trocadas nas colisões p-w e seguir-se-á uma colisão p-p;
 - *as partículas não chegam às paredes simultaneamente:* neste caso, uma das partículas chega à parede e é por ela refletida. Então, há duas outras possibilidades:
 - * a partícula na parede alcança a outra partícula antes que esta chegue a sua parede, ocorrendo, assim, uma colisão p-p;
 - * a partícula na parede não consegue alcançar a outra partícula; esta partícula é refletida na parede e, só então ocorre uma colisão p-p.
- **as partículas deslocam-se no mesmo sentido:** a partícula mais rápida é refletida na parede, colisão p-w, e é seguida por uma colisão p-p.

Repete-se, então, a lógica inicial.

Como já conhecemos a lógica empregada nas simulações, apresentamos os resultados numéricos para as seguintes condições iniciais arbitrariamente escolhidas: $v_1(1) = -4,50$ e $v_2(1) = 4,07$ e $x_c(1) = 0,6673$ para 1 milhão de iterações e $L = 1$. Esta escolha ilustra os casos representativos da dinâmica do problema. Outras condições iniciais que poderiam ser escolhidas dariam qualitativamente os mesmos resultados (como verificamos várias vezes nos experimentos numéricos mas, por uma questão de espaço não foram aqui incluídos).

O primeiro resultado numérico que obtemos foi o Espaço de Estado (Fig. 3.5) para alguns valores de θ e, por conseguinte, para algumas razões de massas γ , conforme a Eq. (3.12). Isto fora feito registrando-se, em cada iteração, um estado associado a colisão p-p e outro estado à colisão p-w. Observamos que os estados são gerados de acordo com

$$z_k = e^{ik\theta} \overline{z_0}, \quad (3.13a)$$

$$Z_k = e^{ik\theta} z_0, \quad (3.13b)$$

ou seja, os estados possíveis são gerados por rotações sucessivas de $\overline{z_0}$ e z_0 , de maneira a distribuir os estados z_k e Z_k segundo o ângulo θ reduzido ao primeiro quadrante. Assim, as Eqs. (3.13a)-(3.13b) mostram que os estados gerados constituem um grupo diedral (**Apêndice B**). Os estados z_k e Z_k apresentam-se aos pares na Fig. 3.5 porque, na Eq. (3.13a), z_0 é refletido antes da rotação pelo ângulo θ , enquanto na Eq. (3.13b) a rotação por θ é direta, gerando-se uma defasagem na posição angular. Exceto o Espaço de Estado da Fig. 3.5(h), todos são efetivamente rotações por um ângulo reduzido ao primeiro quadrante tal que $\frac{\theta}{\pi}$ é racional e, portanto, temos um número finito de estados. O número de estados possíveis, uma vez conhecido $\frac{\theta}{\pi} = \frac{m}{n}$, é $N_{es} = 4n$. Portanto, como as rotações são racionais, para as razões de massas correspondentes, o sistema não é ergódico. Por outro lado, casos como o da Fig. 3.5(h), em que $\gamma = \frac{1}{2}$, temos $\frac{\theta}{\pi}$ irracional⁽²⁾ e, como mostramos no **Apêndice A**, rotações irracionais são ergódicas. Mas, neste caso, geraram-se apenas 128 estados em 1 milhão de iterações, mostrando que o sistema aparentemente deixa de ser ergódico (quebra de ergodicidade). Este número baixo de estados se contrapõe ao caso da Fig. 3.5(i), em que a partícula **1** tem massa muito maior que a **2**, pois geram-se 360 estados, apesar de ser não ergódico. Isto ilustra que a simples observação do número de pontos no Espaço de Estado é insuficiente para se inferir se o sistema é ou não ergódico para casos semelhantes ao da Fig. 3.5(h).

²O **Apêndice E** apresenta a prova da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$ para alguns valores particulares de γ .

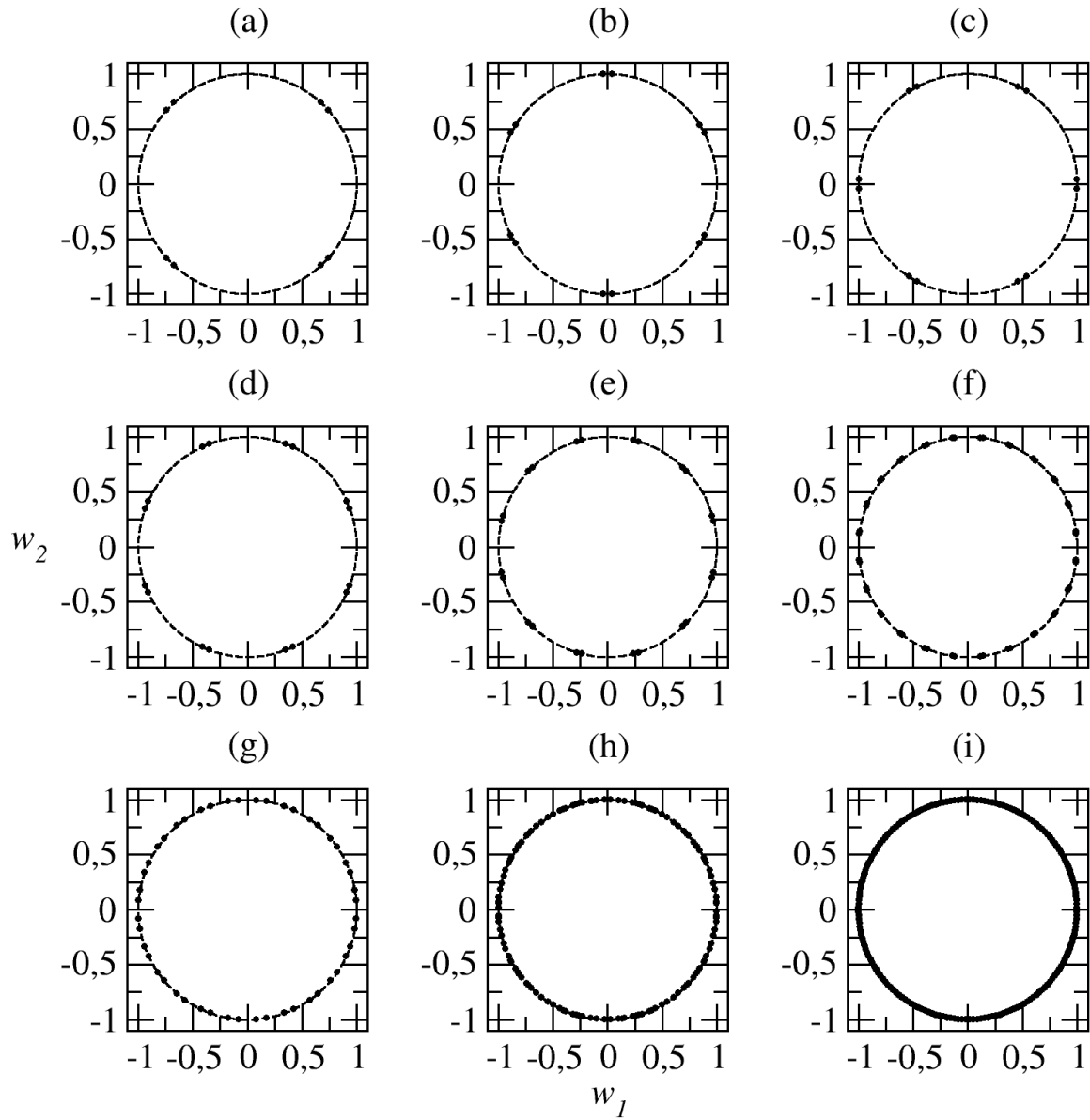


Figura 3.5: Espaços de Estado para: (a) $\gamma = 1$, $\theta = \frac{\pi}{2}$ (90°), $N_{es} = 8$; (b) $\gamma = \frac{1}{3}$, $\theta = \frac{\pi}{3}$ (60°), $N_{es} = 12$; (c) $\gamma = 3$, $\theta = \frac{2\pi}{3}$ (120°), $N_{es} = 12$; (d) $\gamma = \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}$, $\theta = \frac{\pi}{4}$ (45°), $N_{es} = 16$; (e) $\gamma = \frac{2-\sqrt{3}}{2+\sqrt{3}}$, $\theta = \frac{\pi}{6}$ (30°), $N_{es} = 24$; (f) $\gamma = \frac{4-\sqrt{6}-\sqrt{2}}{4+\sqrt{6}+\sqrt{2}}$, $\theta = \frac{\pi}{12}$ (15°), $N_{es} = 48$; (g) $\gamma = \frac{4-\sqrt{6}+\sqrt{2}}{4+\sqrt{6}-\sqrt{2}}$, $\theta = \frac{5\pi}{12}$ (75°), $N_{es} = 48$; (h) $\gamma = \frac{1}{2}$, $\theta = 1,2309594\dots$ ($70,528779\dots^\circ$), $N_{es} = 128$; (i) $\gamma = \frac{1-\cos\frac{\pi}{90}}{1+\cos\frac{\pi}{90}}$, $\theta = \frac{\pi}{90}$ (2°), $N_{es} = 360$. Exceto o gráfico (h), todos são comprovadamente não ergódicos.

Um outro recurso para se ter uma evidência qualitativa da presença de ergodicidade é através do Espaço de Fase. A Fig. 3.6 mostra os Espaços de Fases para quatro valores das razões das massas relativas à partícula **1**: sempre que a partícula **1** colidir com a parede em $x_1 = 0$ ou com a partícula **2**, registra-se a posição x_1 e o momento p_1 . Este é o mapeamento de colisões mencionada na seção 2.3. Foram realizadas 2 milhões de iterações ⁽³⁾, em que cada iteração corresponde a uma colisão p-p ou p-w de qualquer uma das partículas. Observe nos Espaços de Fases correspondentes aos $\frac{\theta}{\pi}$ racionais que os pontos (x_1, p_1) se acumulam em linhas bem definidas, enquanto para o caso da Fig. 3.6(c), os pontos (x_1, p_1) aparentam se difundir pelo Espaço de Fase. Como é melhor

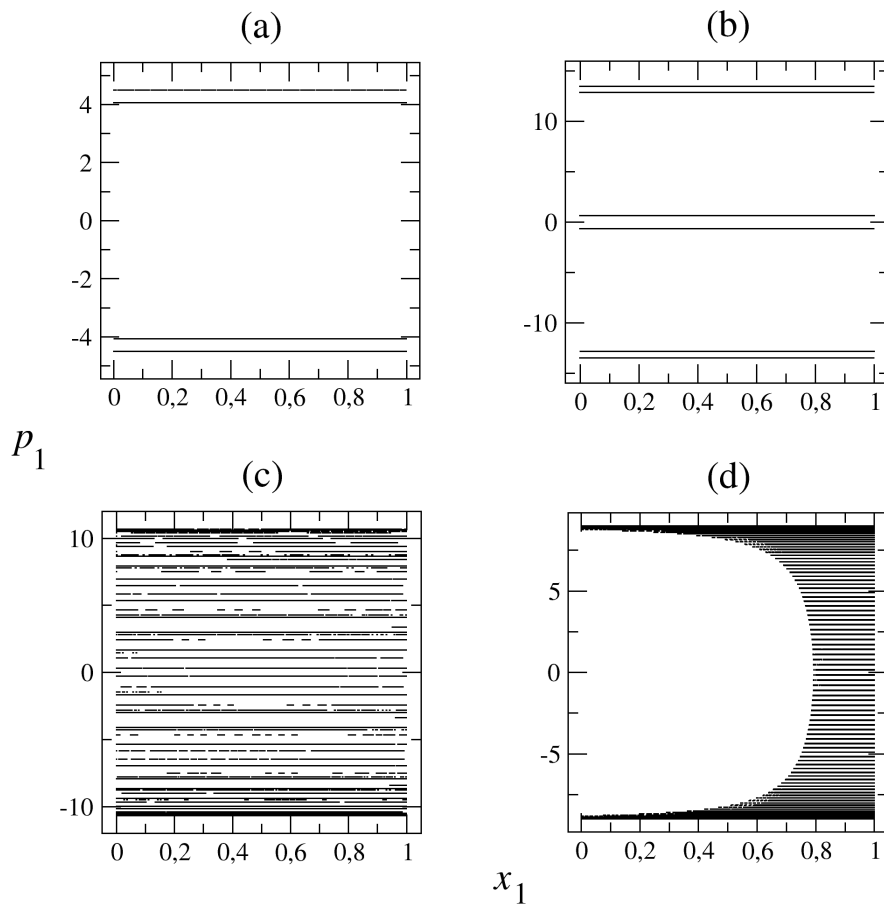


Figura 3.6: Espaço de Fase para: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = \frac{1}{3}$; (c) $\gamma = \frac{1}{2}$; (d) $\gamma = \frac{1 - \cos \frac{\pi}{90}}{1 + \cos \frac{\pi}{90}}$. Os casos não ergódicos apresentam um acúmulo de pontos em linhas bem definidas.

visível nas Figs. 3.6(a)-(b), note que o número de momentos distintos para cada partícula é a metade do número de estados possíveis, ou seja, se fizéssemos também o Espaço de Fase para a partícula **2**, verificaríamos a equação $N_{es} = 4n$. Isto vale também para a Fig. 3.6(d), que corresponde ao caso da Fig. 3.5(i), mas a sua aparência distinta dos

³Realizamos também para os casos presumivelmente ergódicos 10 milhões ou mais de iterações e não observamos diferença qualitativa no aspecto nos Espaços de Fases. A Fig. 3.13 ratifica a lenta geração de novas velocidades. Esta lentidão é tratada analiticamente no Capítulo 4.

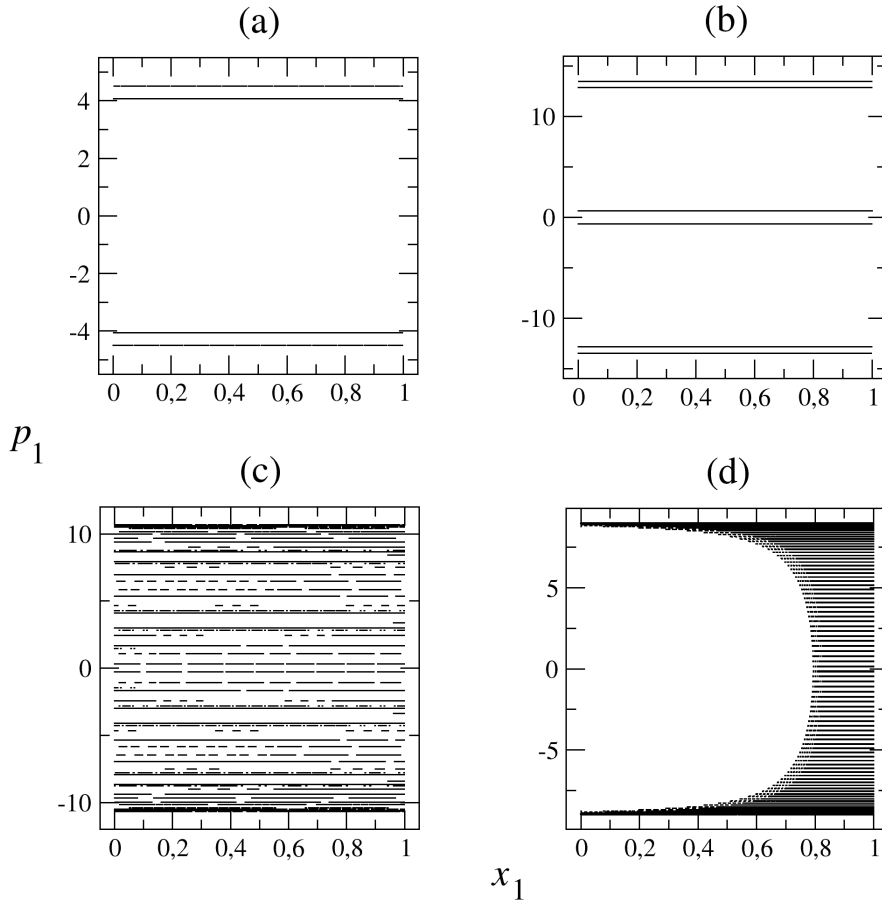


Figura 3.7: Seções de Poincaré para: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = \frac{1}{3}$; (c) $\gamma = \frac{1}{2}$; (d) $\gamma = \frac{1 - \cos \frac{\pi}{90}}{1 + \cos \frac{\pi}{90}}$. Não há diferença qualitativa alguma com os Espaços de Fases da Fig. 3.6.

demais se deve ao valor de $\gamma \ll 1$. Isto significa que a massa da **1** é muito maior que a da **2** e isto repercute na transferência de momento entre as partículas. Analisemos mais detalhadamente este caso. Em vista de nossa condição inicial, a **1** aproxima-se da parede em 0 e, em cada colisão p-p, o momento $|p_1|$ aumenta por uma quantidade muito pequena até que seja refletida pela parede; daí, à medida que a **1** se aproxima da parede em $L = 1$, as sucessivas colisões p-p reduzem o momento $|p_1|$ também por pequenas quantidades. Essas pequenas variações de $|p_1|$ em cada colisão acumulam-se também em linhas muito bem definidas não aparentes na escala da Fig. 3.6(d), pois já sabemos que este caso não é ergódico. Os valores altos de $|p_1|$ ocorrem por todo o intervalo finito, correspondendo às situações semelhantes à condição inicial. No entanto, intuitivamente falando, em vista das sucessivas colisões de uma partícula muito massiva com outra pouco massiva, a **1** aumenta o momento $|p_1|$ quando se afasta de $L = 1$ e diminui $|p_1|$ quando se aproxima da parede em 0, de forma que, por ter menos energia cinética que a **2**, a variação dos valores de $|p_1|$ são maiores. Por isso, nas proximidades de $L = 1$, há linhas de momentos mais nítidas.

Confeccionamos também as Seções de Poincaré para as razões das massas da Fig. 3.6: sempre que a partícula **2** atingir a extremidade $x_2 = 1$, registamos o ponto (x_1, p_1) . As Seções de Poincaré obtidas, Fig. 3.7, são qualitativamente semelhantes aos Espaços de Fases e nenhuma informação adicional é obtida. A diferença está no número de pontos, que é menor nas Seções de Poincaré. Isto já era esperado porque a construção do Espaço de Fase também é uma discretização do sistema dinâmico.

3.3 Colisões Consecutivas

As colisões entre as partículas ocorrem em duas configurações de movimento distintos: antiparalelo (AP), se $v_1 > 0$ e $v_2 < 0$; e paralelo (P), se $v_1 < 0$ e $v_2 < 0$, ou $v_1 > 0$ e $v_2 > 0$. No intuito de quantificar o número de colisões AP e P nas simulações numéricas, definimos uma função cumulativa $S : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}$ que é igual a:

- -1, se a primeira colisão p-p for AP;
- 1, se a primeira colisão p-p for P.

Além disso, nas colisões p-p seguintes, se a I -ésima colisão p-p for:

- AP, subtrai-se 1 unidade do valor da função da colisão imediatamente anterior;
- P, adiciona-se 1 unidade ao valor da função da colisão imediatamente anterior.

Considerando $S(0) = 0$, a função $S : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}$ pode ser expressa formalmente como

$$S(I) = \begin{cases} S(I-1) - 1, & (\text{AP}) \\ S(I-1) + 1, & (\text{P}) \end{cases} . \quad (3.14)$$

Aplicando esta função nas simulações numéricas para 4 razões das massas ($\gamma = 1$, $\gamma = 3$, $\gamma = 2$ e $\gamma = 150$), observamos que a maioria das colisões são AP, independentemente dos valores de γ , pois a função cumulativa $S(I)$ é negativa (Fig. 3.8). Além disso, nos gráficos das Figs. 3.8(a)-(d) notamos que $|S(I)| < I$, significando que entre as colisões AP, há colisões P intercaladas; de fato, as Figs. 3.8(e)-(f), que são ampliações dos gráficos das Figs. 3.8(a)-(d), mostram alguns trechos com segmentos de reta crescentes entre segmentos de reta decrescentes.

Esses resultados ainda são insuficientes para se entender o porquê da prevalência de colisões AP sobre as colisões P. Identificamos, então, que as colisões AP originam-se de

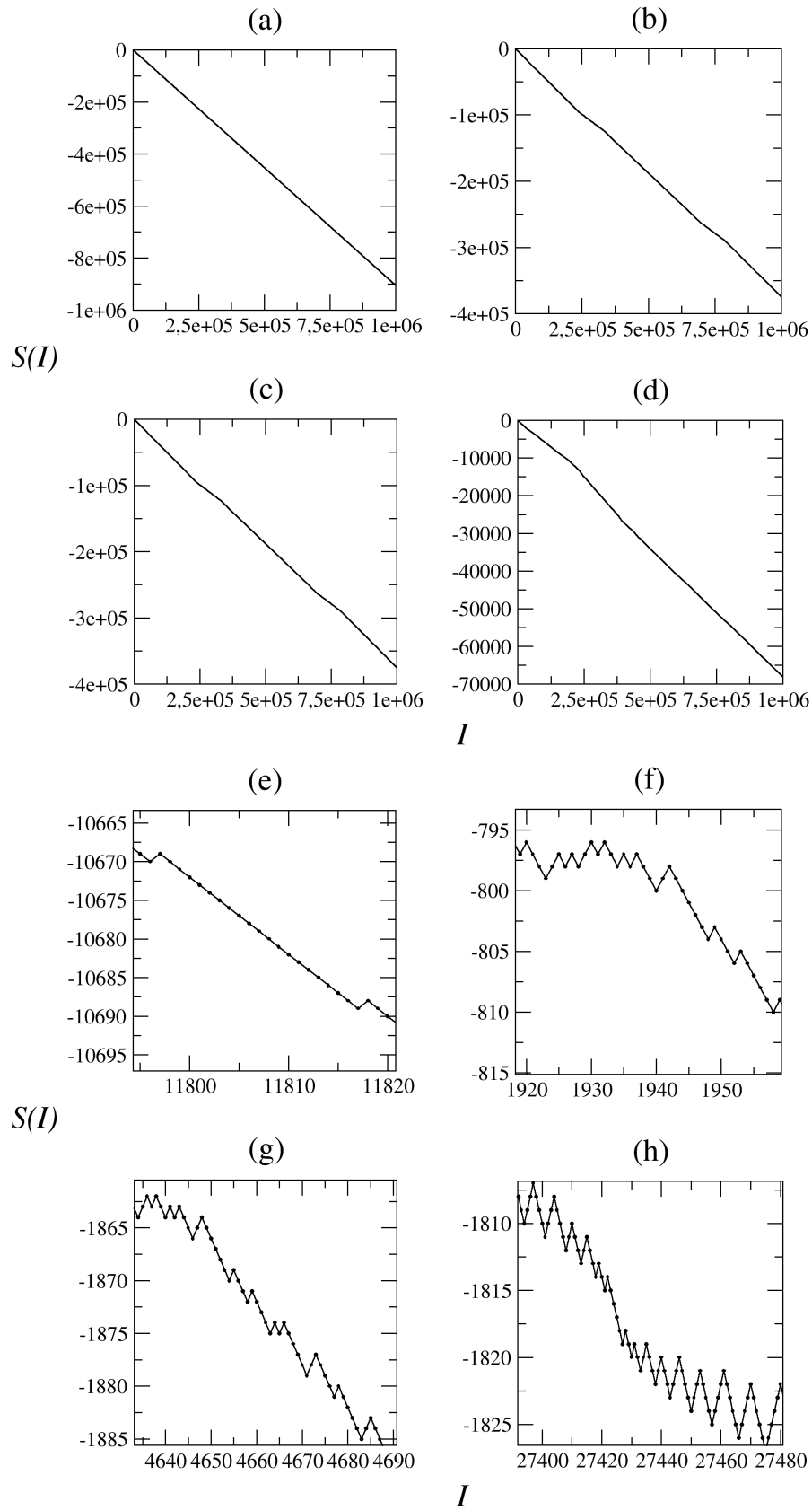


Figura 3.8: Função cumulativa $S(I)$ para: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 3$; (c) $\gamma = 2$; (d) $\gamma = 150$. As colisões AP predominam nesses 4 casos. Os gráficos (e)-(h) são as ampliações de (a)-(d), respectivamente, mostrando que localmente há uma alternância de colisões AP e P.

duas configurações de movimento distintos. A seguir, definimos essas colisões AP, assim como a colisão P, conforme a configuração de movimento *pós-colisão* (a partir daqui, estará implícito que essas definições se referem à última colisão p-p):

- **Colisão Antiparalela Completa:** saindo as partículas antiparalelamente, ambas colidem com as paredes, não necessariamente ao mesmo tempo, e colidem antiparalelamente entre si;
- **Colisão Antiparalela Incompleta:** saindo as partículas paralelamente, uma delas colide com a parede, e depois colidem antiparalelamente entre si;
- **Colisão Paralela:** saindo as partículas antiparalelamente, uma delas colide com a parede, e depois colidem paralelamente entre si.

A Fig. 3.9 ilustra essas colisões.

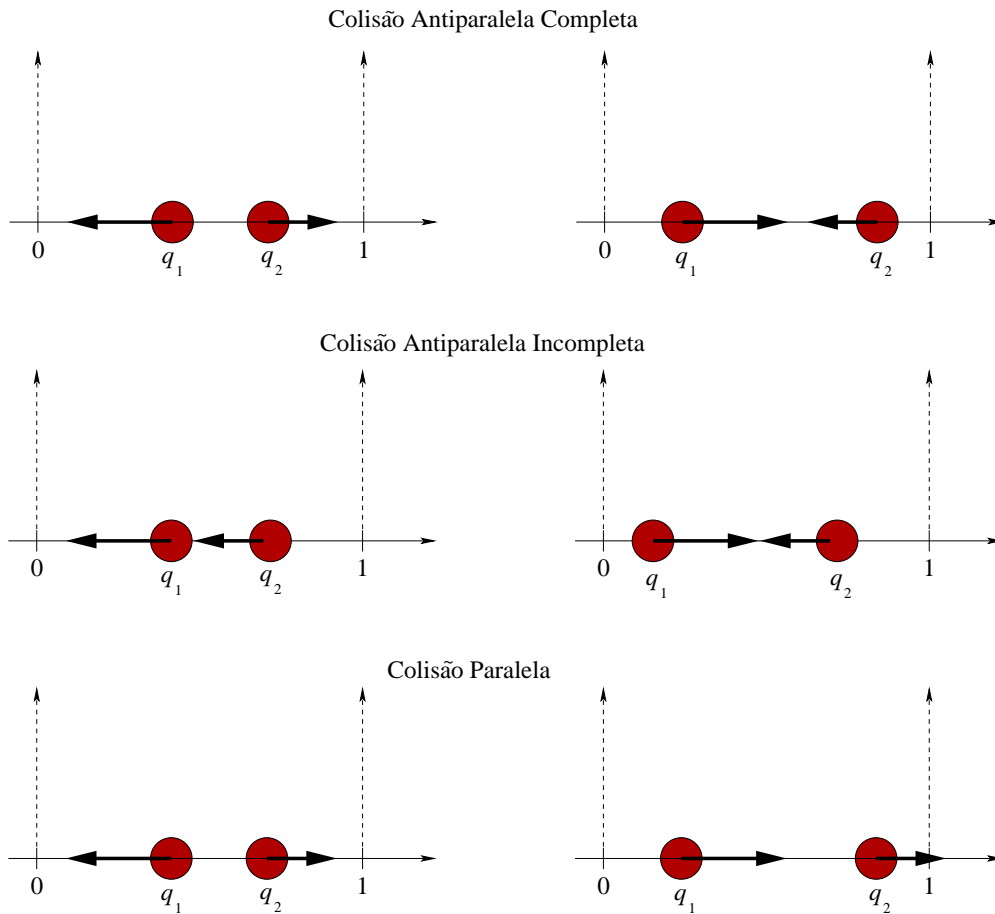


Figura 3.9: Tipos de configurações de colisões p-p após uma colisão p-p.

Realizamos também simulações numéricas para se determinar o número de colisões AP completa, AP incompleta e P para as 4 razões das massas usadas anteriormente para

a função da Eq. (3.14). Para isto, definimos uma função contadora $N_c : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ tal que:

- $N_c(0) = 0$, para as 3 colisões;
- se a I -ésima colisão p-p for AP completa, $N_c(I) = N_c(I-1) + 1$; e $N_c(I) = N_c(I-1)$ para as outras duas colisões;
- se a I -ésima colisão p-p for AP incompleta, $N_c(I) = N_c(I-1) + 1$; e $N_c(I) = N_c(I-1)$ para as outras duas colisões;
- se a I -ésima colisão p-p for P, $N_c(I) = N_c(I-1) + 1$; e $N_c(I) = N_c(I-1)$ para as outras duas colisões.

Assim sendo, o comportamento de $N_c(I)$ para as razões das massas já citadas estão exibidas na Fig. 3.10. Note que, à medida que a razão das massas aumenta, o número de colisões AP completas diminui e as colisões AP incompletas e P aumentam. Isto acontece porque o aumento do valor de γ e, conseqüentemente, o aumento da diferença entre os valores das massas, repercute na troca de velocidades nas colisões p-p da seguinte maneira: supondo que as partículas colidam AP, provavelmente nesta colisão as partículas sairão com a configuração P de movimento, pois a partícula menos massiva não tem, em geral, energia suficiente para mudar o sentido do movimento da partícula mais massiva. Esta inversão acontecerá após várias colisões AP incompletas. Neste caso, a menos massiva ficará gradativamente mais rápida que a mais massiva. Após esta inversão, a colisão seguinte será P e, em cada colisão p-p, provavelmente as partículas sairão com uma configuração de movimento AP, de modo que a partícula menos massiva reduz a sua velocidade e a mais massiva aumenta a sua velocidade em cada colisão p-p. Esta sequência de colisões P permanecerá até que a partícula mais massiva colida com a parede antes que a menos massiva a alcance. Quando isto acontecer, dar-se-á o início a uma nova sequência de colisões AP incompletas. Portanto, temos aqui um favorecimento às colisões consecutivas AP incompletas e P em detrimento de colisões AP completas. Além disso, neste caso percebemos que a sequência de colisões AP incompletas origina uma sequência de colisões P, explicando a proximidade dos valores de $N_c(I)$, como pode ser visto nos gráficos da Fig. 3.10(e)-(h), representados nas cores verde e vermelho, respectivamente.

A Fig. 3.11 ilustra o número de colisões $N_c(I)$ para mais alguns exemplos das razões de massas nas quais predominam colisões AP completas e o crescimento do número de colisões AP incompletas e P conforme se aumenta a diferença entre as massas das partículas. Especificamente, o número de colisões AP completas para $\gamma = 3, 5$ é próxima do número de colisões para as duas outras colisões, Figs. 3.11(b)-(c). Isto não quer dizer que essa

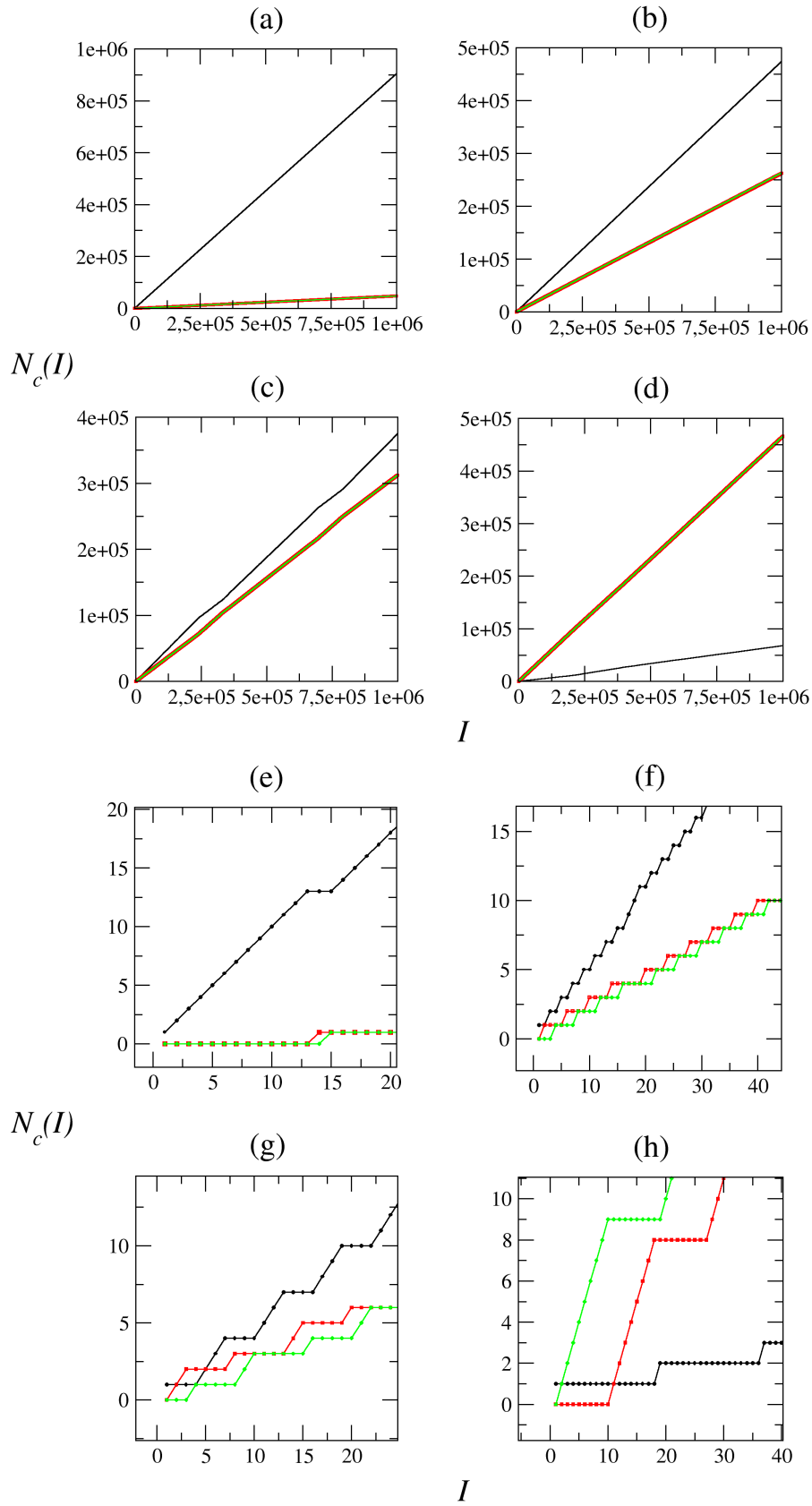


Figura 3.10: Número de colisões AP e P $N_c(I)$ para: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 3$; (c) $\gamma = 2$; (d) $\gamma = 150$. Linha preta: colisões AP completas; linha verde: colisões AP incompletas; linha vermelha: colisões P. Os gráficos (e)-(h) são as ampliações de (a)-(d), respectivamente.

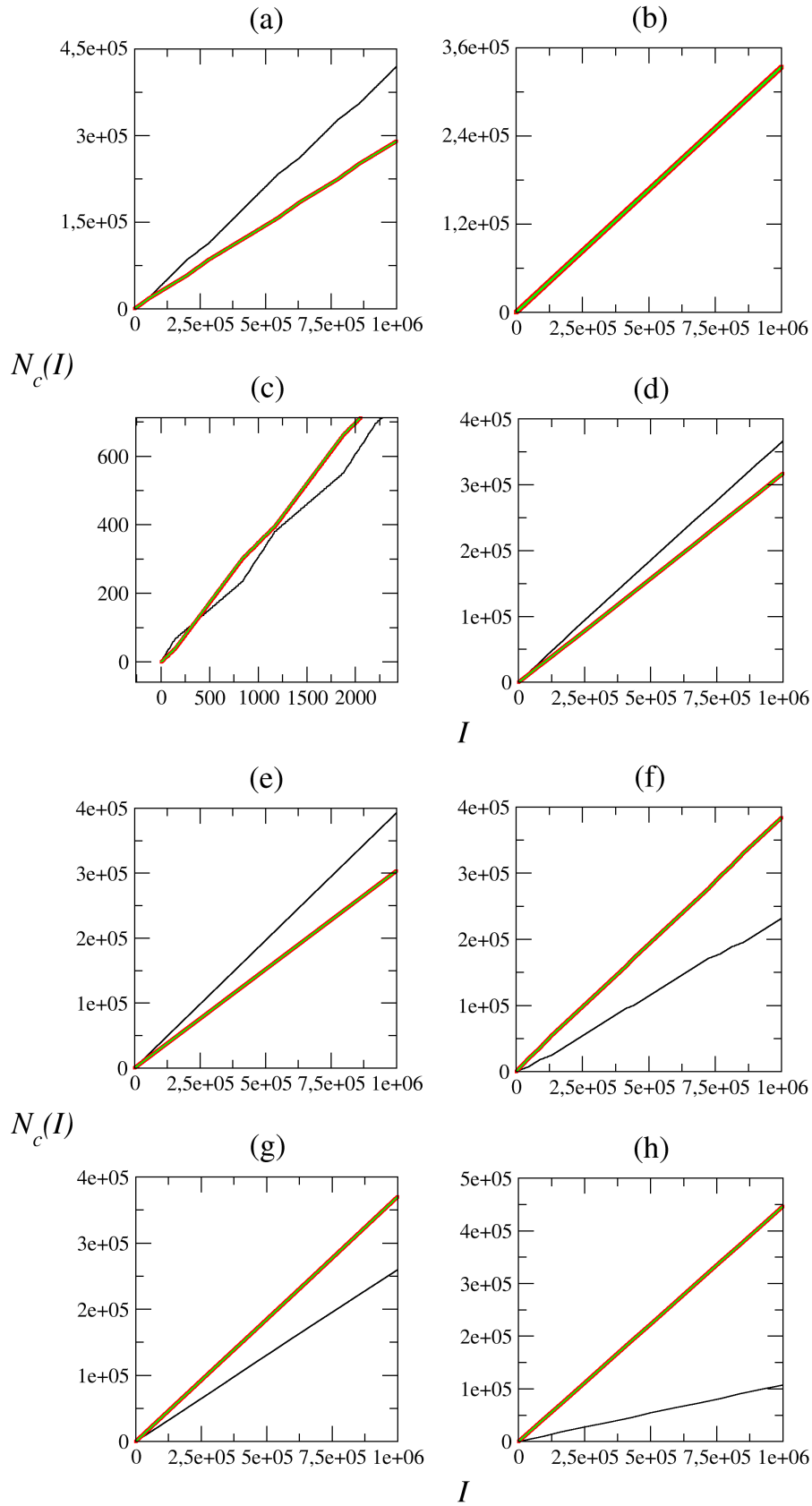


Figura 3.11: Número de colisões AP e P $N_c(I)$ para: (a) $\gamma = 2,5$; (b) $\gamma = 3,5$; (c) $\gamma = 3,5$ ampliada; (d) $\gamma = 4$; (e) $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$; (f) $\gamma = 10$; (g) $\gamma = \frac{2+\sqrt{3}}{2-\sqrt{3}}$; (h) $\gamma = \frac{4+\sqrt{6}+\sqrt{2}}{4-\sqrt{6}-\sqrt{2}}$. Linha preta: colisões AP completas; linha verde: colisões AP incompletas; linha vermelha: colisões P.

razão das massas seja um caso especial, pois, mudando-se as condições iniciais, não se verifica mais esse resultado; assim, é possível se observar esse resultado para uma razão das massas diferente.

É claro que esta análise vale também para razões das massas inversas, como podemos ver nos gráficos da Fig. 3.12. Aparentemente, esses gráficos são iguais aos da Fig. 3.10, mas a comparação das duas versões ampliadas, Figs. 3.10(e)-(h) e Figs. 3.12(e)-(h), mostram que são realmente diferentes. A semelhança qualitativa entre esses resultados indicam que podemos restringir a nossa análise ou para valores de $\gamma > 1$ ou $\gamma < 1$. Constataremos isso em seções posteriores.

Obtemos numericamente o número de estados distintos em função do número de iterações (Fig. 3.13). Para os casos em que $\frac{\theta}{\pi}$ é racional, verificamos alternativamente a relação $N_{es} = 4n$. Para os casos em que $\frac{\theta}{\pi}$ é irracional (a prova da irracionalidade encontra-se no **Apêndice E**), temos 436 estados para $\gamma = 2$ e 460 estados para $\gamma = 150$ em 1 milhão de iterações, mostrando a lenta geração de novos estados. No primeiro caso, de acordo com a Fig. 3.10(c), predominam colisões AP completas. Tais colisões “atrasam” a geração de novos estados. Para se ver isto, usamos a Eq. (3.13a) em duas colisões AP completas consecutivas:

- saindo as partículas de uma mesma posição em direção às respectivas extremidades do intervalo $[0, 1]$ com um estado z_0 , se ambas colidem com as paredes, temos $z_1 = -z_0$;
- as partículas colidem entre si, dando

$$z_2 = -e^{i\theta} \overline{z_0},$$

que é a primeira colisão AP completa;

- repetindo os dois passos anteriores, temos

$$z_3 = -z_2 \quad \text{e} \quad z_4 = e^{i\theta} \overline{z_3} = z_0,$$

a segunda colisão AP completa.

Logo, em colisões AP completas consecutivas, geram-se apenas dois estados diferentes. Então, se no sistema ocorrerem uma sequência longa dessas colisões, não gerar-se-á nenhum estado novo além desses dois, como ocorre para razões das massas em torno de

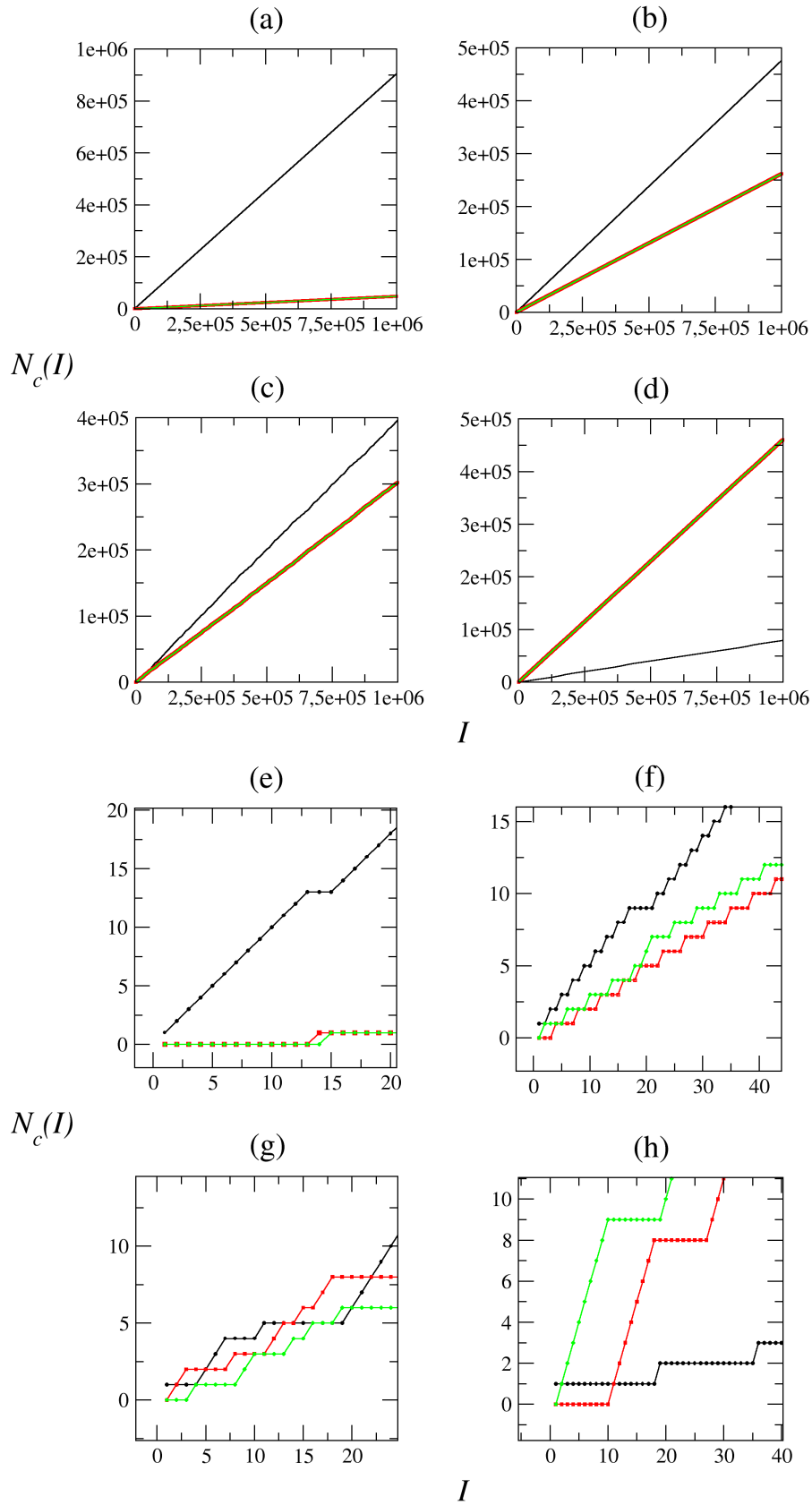


Figura 3.12: Número de colisões AP e P $N_c(I)$ para: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = \frac{1}{3}$; (c) $\gamma = \frac{1}{2}$; (d) $\gamma = \frac{1}{150}$. Linha preta: colisões AP completas; linha verde: colisões AP incompletas; linha vermelha: colisões P. Os gráficos (e)-(h) são as ampliações de (a)-(d), respectivamente.

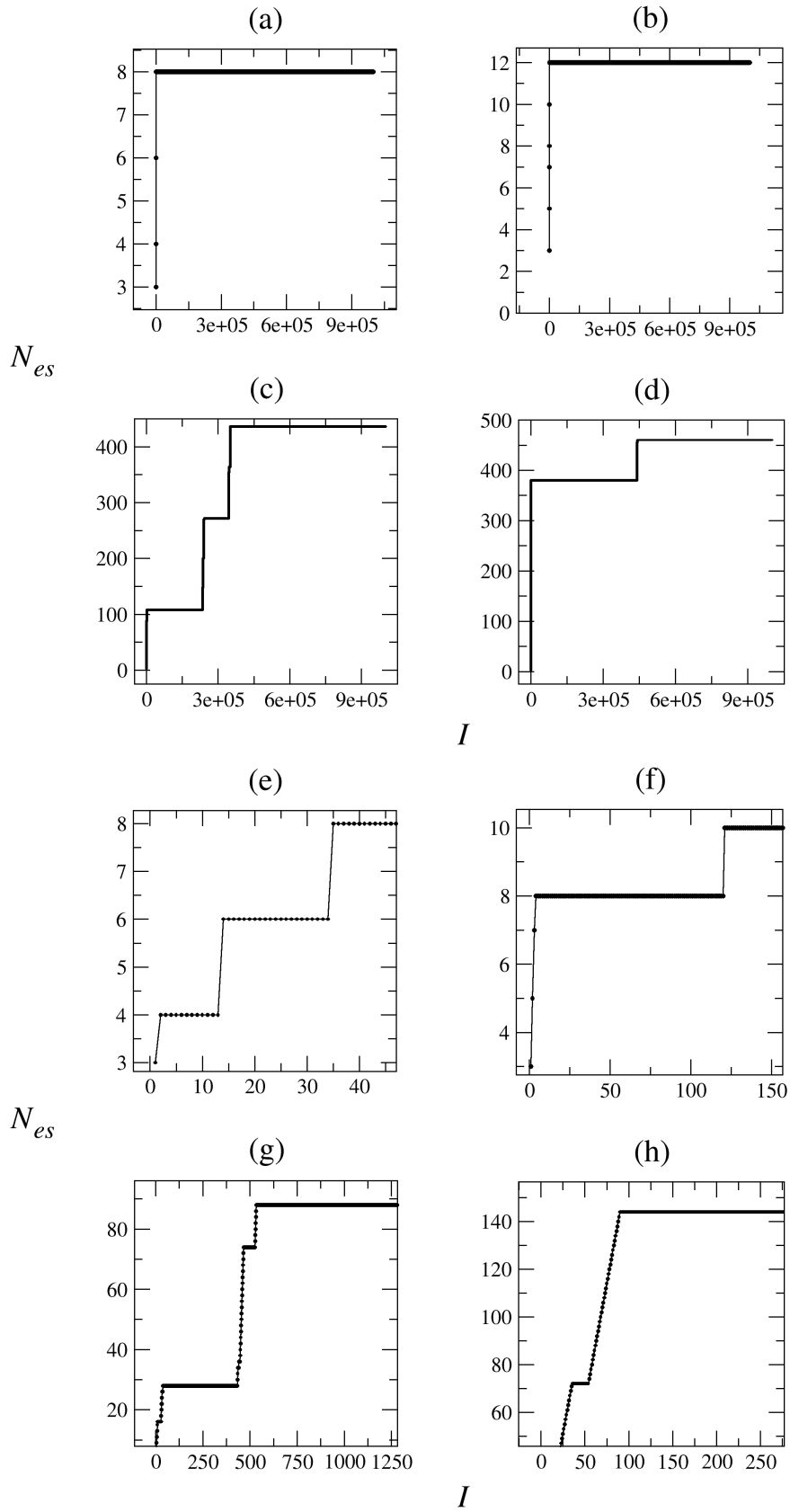


Figura 3.13: Número de Estados em função do número de iterações para: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 3$; (c) $\gamma = 2$ (436 estados); (d) $\gamma = 150$ (460 estados). Os gráficos (e)-(h) são as ampliações de (a)-(d), respectivamente.

$\gamma = 1$. Isto indica, a princípio, que bastaria se afastar da razão das massas $\gamma = 1$ para reduzir o número de colisões AP completas e, assim, gerar mais estados novos. No entanto, isto não é corroborada pela Fig. 3.13(d), o nosso segundo caso, $\gamma = 150$, que deveria gerar um grande número de estados. Pelo contrário, o resultado numérico evidencia que a diminuição de colisões AP completas e o aumento de colisões AP incompletas e P, não influencia significativamente na geração de novos estados. Situações como essas serão melhor investigadas nas seções posteriores.

Em qualquer caso, não se gera quantidade suficiente de estados em um número finito de colisões que nos permita inferir se o sistema é ou não ergódico. Portanto, temos duas possibilidades: na primeira, a ergodicidade frustra-se (quebra de ergodicidade), apesar das razões das massas corresponderem a rotações irracionais, uma condição necessária para que o sistema seja ergódico; na segunda possibilidade, o sistema é ergódico de fato, pois assintoticamente a ergodicidade devido a rotações irracionais é satisfeita (**Apêndice A**). Embora não resolvemos esse impasse, o nosso estudo esclarece mais detalhadamente a lenta geração de estados, independentemente se o sistema é ou não ergódico. Mesmo assim, a literatura [26, 36] apresenta resultados que sustentam a não ergodicidade do sistema.

A quebra de ergodicidade, como explicação pela lenta geração de estados, foi proposta por M. Hasegawa [26], o qual identificou ser devida às colisões AP completas (zona de barreira, como Hasegawa o denomina). Esta é uma explicação geral válida para qualquer valor de γ , mas sem a distinção dinâmica que observamos em nossos resultados numéricos.

Notamos até aqui a existência de 3 tipos de colisão p-p em nosso sistema. Cada uma delas iteram por um certo número de colisões e a isto denominamos de colisões consecutivas. Para distinguir esses 3 tipos de colisão, definimos as seguintes siglas:

- CCP: Colisões Consecutivas Paralelas;
- CCAPI: Colisões Consecutivas Antiparalelas Incompletas;
- CCAPC: Colisões Consecutivas Antiparalelas Completas.

No Capítulo 4 a seguir, analisaremos como são os estados gerados e as posições de colisão para cada uma dessas colisões consecutivas, a fim de se elaborar uma interpretação analítica dos resultados numéricos. Estudamos essas colisões consecutivas porque as CCP e CCAPI geram estados novos e as CCAPC funcionam como uma transição de um conjunto de CCP e CCAPI para outro. Os detalhes dos cálculos do próximo capítulo encontram-se no **Apêndice C**.

Estudo Analítico das Classes de Trajetórias nos Processos de Colisão

Neste capítulo apresentamos uma classificação de colisões consecutivas que representam classes de trajetórias dinâmicas no Espaço de Fase. O nosso sistema transita entre essas trajetórias que podem levar ou não à geração de velocidades novas. Começamos pela exposição individual de cada uma dessas colisões consecutivas possíveis para, posteriormente, provar a dependência entre elas. Veremos também que, conforme a razão das massas, certos tipos de colisões consecutivas prevalecem sobre as outras. Isso concorda com os resultados numéricos que apresentamos no Capítulo 3.

4.1 Colisões Consecutivas Paralelas (CCP)

Colisões Consecutivas Paralelas (CCP) é uma sequência de colisões p-p nas quais as partículas possuem velocidades de mesmo sinal. Para que as CCP ocorram, após cada colisão p-p, as partículas devem sair com uma configuração de movimento antiparalela (a velocidade da **1** deve ser negativa e da **2**, positiva), de modo que a partícula mais rápida reflita na parede e desloca-se para se chocar paralelamente com a outra partícula, que não colidiu com sua parede.

As CCP podem ocorrer de duas maneiras diferentes:

1. imediatamente antes de cada colisão p-p, as velocidades das partículas são positivas. Intuitivamente, para que ocorram as CCP, é necessário que $\gamma > 1$. Denominemos de caso $\gamma > 1$;

2. imediatamente antes de cada colisão p-p, as velocidades das partículas são negativas e, intuitivamente, para que ocorram as CCP, é necessário que $\gamma < 1$. Denominemos de caso $\gamma < 1$.

Vejamos cada uma dessas situações nas próximas subseções.

4.1.1 Caso $\gamma > 1$

Considere a situação representada na Fig. 4.1. Sejam $v_1^{(0)}$ e $v_2^{(0)}$ as velocidades iniciais das partículas tal que $0 < v_2^{(0)} < v_1^{(0)}$; $w_1^{(0)} = \alpha$ e $w_2^{(0)} = \beta$ as velocidades normalizadas, de modo que o estado inicial seja $z_0 = \alpha + i\beta$.

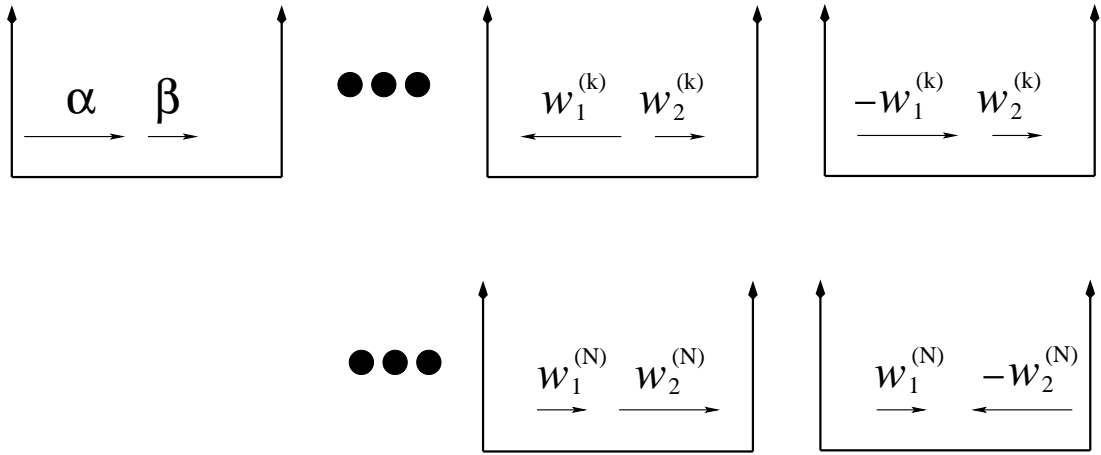


Figura 4.1: Colisões Consecutivas Paralelas: o estado inicial corresponde a 2 partículas com velocidades positivas que colidem paralelamente e saem antiparalelamente após cada colisão. Isso acontece até que a **1** fique mais lenta que **2**, na N -ésima colisão.

Nas sucessivas colisões, ocorre colisão p-p alternada com colisão da partícula **1** com a parede em $x_1 = 0$. Assim, os estados gerados, com $k > 0$, são dados respectivamente por,

$$z_{2k-1} = (-1)^{k+1} e^{ik\theta} \overline{z_0}, \quad (4.1a)$$

$$z_{2k} = (-1)^k e^{-ik\theta} z_0. \quad (4.1b)$$

Para que isto seja verdade, a velocidade da partícula **1** deve ser negativa após cada colisão p-p, que é garantida se a razão entre as velocidades iniciais normalizadas obedecer

$$\frac{\alpha}{\beta} > -\operatorname{tg} k\theta, \quad \theta \in \left(\frac{2k-1}{2k} \pi, \pi \right), \quad (4.2)$$

além da partícula **1** ser mais rápida que a **2**, que é garantida se a razão das velocidades iniciais normalizadas obedecer a relação,

$$\frac{\alpha}{\beta} > \frac{1}{\operatorname{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2}}, \quad \theta \in \left(\frac{2k}{2k+1}\pi, \pi \right). \quad (4.3)$$

Para entender o conteúdo desses resultados, considere $k = 1$ nas Eqs. (4.1). Isto significa que as partículas colidem paralelamente entre si, gerando um estado dado por

$$z_1 = e^{ik\theta} \bar{z}_0 = w_1^{(1)} + iw_2^{(1)},$$

em que $-w_1^{(1)} > 0$ e $w_2^{(1)} > 0$. Usando as representações trigonométricas dessas velocidades, obtemos a relação dada por (4.2), com $k = 1$,

$$\frac{\alpha}{\beta} > -\operatorname{tg} \theta, \quad \theta \in \left(\frac{\pi}{2}, \pi \right). \quad (4.4)$$

Note que o intervalo de validade de θ corresponde ao intervalo $\gamma \in (1, \infty)$, ou seja, para todo $\gamma > 1$. É preciso também que a partícula **1** continue mais rápida que a **2** para que ela possa alcançar a partícula **2** depois da **1** colidir com a parede, cuja condição é dada por (4.3), com $k = 1$,

$$\frac{\alpha}{\beta} > \frac{1}{\operatorname{tg} \frac{3\theta}{2}}, \quad \theta \in \left(\frac{2\pi}{3}, \pi \right), \quad (4.5)$$

garantindo a ocorrência da próxima colisão paralela. Veja que a intersecção dos intervalos de θ de (4.4) e (4.5) é este último. Isto mostra que para a **1** sair com velocidade negativa e ser mais rápida que a **2**, $\theta > \frac{2\pi}{3}$, o que dá $\gamma > 3$. Então, para que as partículas, partindo com velocidades positivas, colidam entre si, a **1** colida com a parede e possa colidir novamente com a **2**, esta deve ter mais que o triplo da massa da **1**. Todas essas condições descritas para $k = 1$ devem ser satisfeitas se ocorrerem colisões subsequentes. Além disso, para se ter cada vez mais CCP, deve-se aumentar o valor de γ , de acordo com o intervalo de validade de θ de (4.3). Por exemplo, para duas CCP, temos $\theta \in \left(\frac{4\pi}{5}, \pi \right)$, implicando que $\gamma > 9,472\dots$, que é mais que o triplo em relação ao caso anterior. Isto indica que podemos usar o intervalo de validade de θ geral para estimar o número máximo de CCP possíveis em termos de θ ,

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)}, \quad (4.6)$$

em que $N = k_m + 1$, com k_m é o último inteiro dos valores de k , para incluir a configuração inicial das partículas, que já é uma colisão paralela; então, o índice k das Eqs. (4.1) é tal

que $k \in [1, N - 1]$.

Enfim, a escolha da razão γ ou de θ determina a relação mínima entre as velocidades iniciais das partículas para que se realize as CCP, conforme as condições (4.4) e (4.5), e o número máximo de CCP dado por (4.6).

Exemplo 1: Considere o sistema de 2 partículas colidindo elasticamente entre si e confinadas no intervalo finito $[0, 1]$, com $\gamma = 4$.

Pela Eq. (3.12), temos $\theta = 2,2142\dots$ rad; por (4.6), estimamos o número de CCP, $N < 2,19\dots$, ou seja, $N = 2$. Como $N = k_m + 1$, temos $k_m = 1$; considerando $k = k_m$ nas condições (4.4) e (4.5), temos

$$\frac{\alpha}{\beta} > 1,333\dots, \quad \frac{\alpha}{\beta} > 5,5.$$

É claro pelos intervalos de validade das inequações (4.4) e (4.5) que, se a segunda inequação for satisfeita, a primeira também. Então, já sabemos que as CCP ocorrerá contanto que $\alpha > 5,5\beta$.

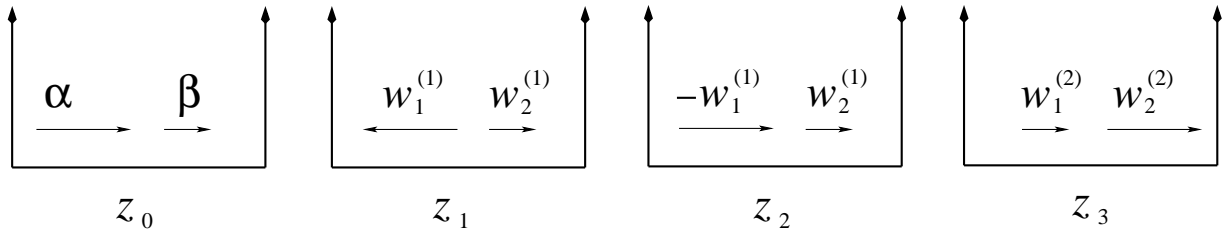


Figura 4.2: CCP para 2 partículas com $\gamma = 4$ e estado inicial $z_0 = \alpha + \imath\beta$. As partículas colidem entre si e saem com um estado $z_1 = w_1^{(1)} + \imath w_2^{(1)}$. A **1** colide com a parede, gerando o estado $z_2 = -w_1^{(1)} + \imath w_2^{(1)}$. Segue-se a segunda colisão p-p, gerando o estado $z_3 = w_1^{(2)} + \imath w_2^{(2)}$, em que a **1** fica mais lenta que a **2**.

Mesmo para $\frac{\theta}{\pi}$ irracional, como é o caso de $\gamma = 4$ (**Apêndice E**), N é finita, pois a **1** perde gradativamente energia cinética para a **2** nas CCP até que a primeira fique mais lenta que a segunda. Então, posteriormente, deverá ocorrer novas CCP que gerem mais estados. Veremos isto no gráfico da Fig. 4.9

Podemos também estimar onde deve ocorrer a primeira CCP ($k = 1$) no intervalo $[0, L]$, a fim de garantir, senão N colisões, a maioria das CCP. Usando as equações horárias das posições das partículas, obtemos a condição para a ocorrência de CCP na forma genérica,

$$\frac{x_0}{L} < \frac{|v_1| - |v_2|}{|v_1| + |v_2|}, \quad (4.7)$$

em que x_0 é a posição de colisão inicial. Normalizando as velocidades, temos

$$\frac{x_0^{(k)}}{L} < -\frac{\sin \frac{(2k+1)\theta}{2} - \frac{\beta}{\alpha} \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}{\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \frac{\beta}{\alpha} \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}}, \quad \text{ou} \quad \frac{x_0^{(k)}}{L} < -\frac{\sin \frac{(2k+1)\theta}{2} - \left(\sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}}\right) \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}{\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \left(\sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}}\right) \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}}, \quad (4.8)$$

em que $\frac{\beta}{\alpha} = \sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}}$. Escolhendo os valores de γ e das velocidades iniciais de acordo com a (4.3), observamos que a posição de colisão inicial deve estar bem próxima da parede em 0, $x_0^{(1)} \approx 0$. Ou seja, mesmo para valores de velocidades iniciais e de razão das massas apropriadas das partículas, somente em condições restritivas para a posição inicial da primeira colisão p-p, poderemos entrar em uma sequência de colisões P que gere o máximo de estados permitidos. Isto repercutirá negativamente na proliferação de estados para $\frac{\theta}{\pi}$ irracional. O exemplo a seguir ilustra um caso simples.

Exemplo 2: Estimativa de $\frac{x_0^{(k)}}{L}$ para $\gamma = 3, 1$.

Neste caso, $\theta = 2, 10853\dots$ rad e $k = N - 1 = 1$. Aplicando estes valores em (4.3), temos $\frac{\alpha}{\beta} > 47, 1408\dots$ Escolhendo $\frac{\alpha}{\beta} = 48$, pela (4.8), a posição de colisão $x_0^{(1)}$ deve ser tal que

$$\frac{x_0^{(1)}}{L} < 4, 4 \times 10^{-4}.$$

4.1.2 Caso $\gamma < 1$

Este caso é análogo ao da subseção anterior. Ainda assim, é importante destacar as diferenças dos resultados entre eles. O estado inicial agora é $z_0 = -\alpha - \imath\beta$. As partículas colidem paralelamente entre si, de maneira que a **2** tenha velocidade positiva e seja mais rápida que a **1**, resultando em

$$z_{2k-1} = e^{\imath k\theta} \overline{z_0}, \quad (4.9a)$$

$$z_{2k} = e^{-\imath k\theta} z_0, \quad (4.9b)$$

ou seja, não há alternância de sinais dos estados. A imposição das condições $-w_1^{(k)} > 0$, $w_2^{(k)} > 0$ e $-v_1^{(k)} < v_2^{(k)}$, dão

$$\frac{\alpha}{\beta} < \frac{1}{\text{tg } k\theta}, \quad \theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k}\right), \quad (4.10)$$

a qual é análoga ao caso $\gamma > 1$ das CCP, condição (4.2),

$$\frac{\alpha}{\beta} < \frac{1}{\text{tg } \frac{(2k+1)\theta}{2}}, \quad \theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k+1}\right), \quad (4.11)$$

análoga à condição (4.3) do caso $\gamma > 1$ das CCP.

Esses intervalos concordam com $\theta \in (0, \pi)$. Além disso, mostram também que essas CCP ocorrerão apenas se $\gamma < 1$, de acordo com a (4.10) e, mais restritamente, se $\gamma < \frac{1}{3}$, conforme (4.11). Estimamos também o número máximo possível de CCP, como feito na seção anterior,

$$N < \frac{\pi + \theta}{2\theta}, \quad (4.12)$$

em que $N = k_m + 1$; logo, também $k \in [1, N - 1]$.

Procedendo-se da mesma maneira como explicado na subseção 4.1.1, a posição de colisão inicial que favorece as CCP é

$$\frac{x_0^{(k)}}{L} > -\frac{2\left(\cos k\theta + \frac{\beta}{\alpha} \sin k\theta\right) \sin \frac{\theta}{2}}{\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \frac{\beta}{\alpha} \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}} \quad \text{ou} \quad \frac{x_0^{(k)}}{L} > -\frac{2\left(\cos k\theta + \left(\sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}}\right) \sin k\theta\right) \sin \frac{\theta}{2}}{\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \left(\sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}}\right) \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}}, \quad (4.13)$$

a qual indica que a posição inicial de colisão deve estar próxima da parede em L , $x_0^{(1)} \approx L$ (o exemplo 10 do **Apêndice C** ilustra este caso).

Obs.: Identificamos que é possível ocorrer colisões consecutivas paralelas em sentidos opostos, ou seja, se as partículas colidem paralelamente com velocidades positivas (negativas), a próxima colisão consecutiva paralela é com velocidades negativas (positivas) (veja o **Apêndice D**). *Provamos que não é possível se ter três colisões paralelas consecutivas alternadas, sendo a terceira necessariamente uma colisão AP incompleta.* Este é um caso particular na discussão de Quebra de Ergodicidade para CCAPI ou CCP.

4.2 Colisões Consecutivas Antiparalelas Incompletas (CCAPI)

Colisões Consecutivas Antiparalelas Incompletas (CCAPI) é uma sequência de colisões p-p nas quais a partícula **1** tem velocidade positiva e a **2**, negativa. Para que haja CCAPI, após cada colisão p-p, as partículas devem sair com uma configuração de movimento paralela (as velocidades das partículas devem ter o mesmo sinal), de modo que a partícula mais rápida se reflita na parede e se desloque para se chocar antiparalelamente com a outra partícula.

Uma sucessão de colisões AP incompletas, ou CCAPI, pode se iniciar imediatamente da última colisão p-p de uma sucessão de N CCP. Isto pode ser dar quando, após a última

colisão das CCP, as partículas ainda tiverem velocidades no mesmo sentido e não poderem mais repetir uma colisão paralela. Note que nas CCP, em cada colisão p-p, a partícula de menor massa perde energia cinética para a de maior massa. Assim, após a N -ésima colisão das CCP, uma das partículas colidirá com a parede, mudando sua velocidade e, então, irá encontrar a outra partícula vindo ao seu encontro, dando início a primeira colisão das novas CCAPI.

Assim como nas CCP, as CCAPI ocorrem também em duas maneiras diferentes:

1. imediatamente depois de cada colisão p-p, as velocidades das partículas são negativas. Intuitivamente, para que ocorra as CCAPI, é necessário que $\gamma > 1$. Denominemos de caso $\gamma > 1$;
2. imediatamente depois de cada colisão p-p, as velocidades das partículas são positivas; intuitivamente, então, é necessário que $\gamma < 1$ para que ocorram as CCAPI. Denominemos de caso $\gamma < 1$.

Detalhemos essas situações nas próximas subseções.

4.2.1 Caso $\gamma > 1$

Considere a situação representada na Fig. 4.3. Procedendo-se da mesma maneira que no caso de CCP, temos

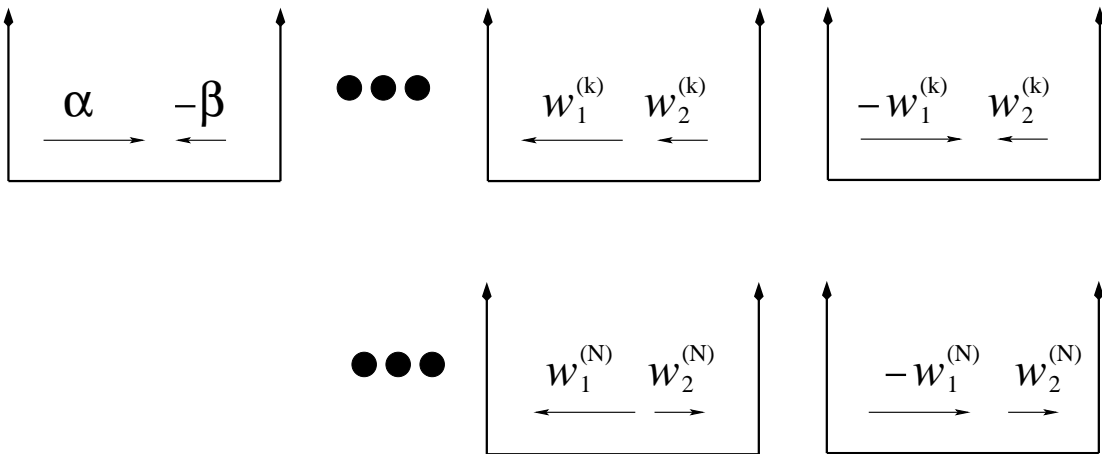


Figura 4.3: Colisões Consecutivas Antiparalelas Incompletas: o estado inicial corresponde a 2 partículas, a **1** com velocidade positiva e a **2** com velocidade negativa. Elas começam a colidir antiparalelamente até a velocidade da **2** se tornar positiva.

$$z_{2k-1} = (-1)^{k+1} e^{ik\theta} \overline{z_0}, \quad z_{2k} = (-1)^k e^{-ik\theta} z_0,$$

como no caso paralelo, mas agora $z_0 = \alpha - i\beta$, com $\alpha > 0$ e $\beta > 0$. Pela imposição de serem negativas as velocidades após a colisão e da **1** ser mais rápida que a **2**, obtemos condições análogas àsquelas das relações (4.2) e (4.3),

$$\frac{\alpha}{\beta} < -\frac{1}{\operatorname{tg} k\theta}, \quad \theta \in \left(\frac{2k-1}{2k}\pi, \pi \right), \quad (4.14)$$

a fim da velocidade da partícula **2** ser negativa após cada colisão, e

$$-\frac{\alpha}{\beta} < \frac{1}{\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2}}, \quad \theta \in \left(\frac{2(k-1)}{2k-1}\pi, \pi \right), \quad (4.15)$$

a fim da **1** ser mais rápida que a **2**. Perceba que, exceto a relação de desigualdade, se obtém a (4.15) de (4.3), trocando-se k por $k-1$. O número máximo $N = k_m + 1$ de CCAPI é

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)}, \quad (4.16)$$

pois a (4.16) desconsidera a colisão associada ao estado inicial z_0 . Além disso, é importante enfatizar que para $k \in [1, N-1]$, ambas as partículas saem com velocidades negativas $w_1^{(k)} < 0$ e $w_2^{(k)} < 0$, de modo que $-v_1^{(k)} > -v_2^{(k)}$. Mas, para $k = N$, temos $w_1^{(N)} > 0$ ou $w_1^{(N)} < 0$ e $w_2^{(N)} > 0$, com a **1** mais lenta que a **2**, $v_1^{(N)} < v_2^{(N)}$, mas ainda $-v_1^{(N)} > -v_2^{(N)}$, mostrando que a N -ésima colisão não é AP incompleta.

As posições de CCAPI podem ser determinadas precisamente porque, enquanto as partículas saírem paralelamente a cada colisão p-p, a colisão AP incompleta estará garantida. Isto não acontece nas CCP, pois a colisão P subsequente depende se a partícula mais rápida consegue, após ser refletida na parede, alcançar a partícula mais lenta. Partindo-se das equações horárias das posições e das velocidades pós-colisão em função das velocidades antes das partículas, obtemos a posição de colisão seguinte em função da posição de colisão imediatamente anterior,

$$x'_0 = \frac{|v_1| - |v_2|}{|v_1| + |v_2|} x_0 \quad \text{ou} \quad x'_0 = \frac{|w_1| \sin \frac{\theta}{2} - |w_2| \cos \frac{\theta}{2}}{|w_1| \sin \frac{\theta}{2} + |w_2| \cos \frac{\theta}{2}} x_0.$$

Para sucessivas colisões, conseguimos uma relação de recorrência de $x_0^{(k)}$ em função de $x_0^{(k-1)}$, $w_1^{(k)}$ e $w_2^{(k)}$, de modo que, em última instância, temos

$$x_0^{(k)} = (-1)^k \frac{\alpha \sin \frac{\theta}{2} + \beta \cos \frac{\theta}{2}}{\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}} x_0, \quad (4.17)$$

mostrando que as posições de colisão $x_0^{(k)}$ são determinadas pelas velocidades iniciais, por

θ e pela posição inicial. Constataremos na seção 4.3 que a Eq. (4.17) vale também para as CCP.

Em suma, sendo z_0 e x_0 o estado e a posição iniciais das partículas, as CCAPI geram mais $N - 1$ estados z_{2k-1} , z_{2k} e posições de colisão $x_0^{(k)}$, com $k \in [1, N - 1]$. Abaixo aplicamos essas ideias para um caso particular.

Exemplo 3: Seja $N = 4$; então, geram-se mais 3 estados e posições de colisão. A Tabela 4.1 sumariza os estados e as posições de colisão possíveis:

k	Estado Ímpar	Estado Par	Posição de Colisão
		z_0	x_0
1	z_1	z_2	$x_0^{(1)}$
2	z_3	z_4	$x_0^{(2)}$
3	$z_5 = z_{2N-3}$	$z_6 = z_{2N-2}$	$x_0^{(3)} = x_0^{(N-1)}$

Tabela 4.1: Estados e posições geradas em CCAPI para $N = 4$.

4.2.2 Caso $\gamma < 1$

O procedimento para se determinar os estados para o caso $\gamma < 1$ de CCAPI é análogo também ao do caso $\gamma < 1$ de CCP, dando

$$z_{2k-1} = e^{ik\theta} \overline{z_0}, \quad z_{2k} = e^{-ik\theta} z_0,$$

em que $z_0 = \alpha - i\beta$. Impondo que as velocidades após a colisão sejam positivas e que a **2** seja mais rápida que a **1**, obtemos

$$\frac{\alpha}{\beta} > \operatorname{tg} k\theta, \quad \theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k}\right), \quad (4.18)$$

$$-\frac{\alpha}{\beta} < \frac{1}{\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2}}, \quad \theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k-1}\right), \quad (4.19)$$

cujo número máximo possível de colisões é

$$N < \frac{\pi + \theta}{2\theta}. \quad (4.20)$$

As posições possíveis de colisão também são obtidas analogamente ao procedimento

da subseção 4.2.1 e, aplicando as relações

$$\sum_{n=0}^k \cos n\theta = \frac{\left(\cos \frac{k\theta}{2}\right)\left(\sin \frac{(k+1)\theta}{2}\right)}{\sin \frac{\theta}{2}}, \quad \sum_{n=0}^k \sin n\theta = \frac{\left(\sin \frac{k\theta}{2}\right)\left(\sin \frac{(k+1)\theta}{2}\right)}{\sin \frac{\theta}{2}},$$

obtemos a posição $x_0^{(k)}$ em termos das velocidades iniciais, de θ e da posição inicial,

$$x_0^{(k)} = \frac{2L \left[\alpha \left(\left(\cos \frac{k\theta}{2} \right) \left(\sin \frac{(k+1)\theta}{2} \right) - \sin \frac{\theta}{2} \right) - \beta \left(\sin \frac{k\theta}{2} \right) \left(\sin \frac{(k+1)\theta}{2} \right) \right] + \left(\alpha \sin \frac{\theta}{2} + \beta \cos \frac{\theta}{2} \right) x_0}{\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}. \quad (4.21)$$

Esta equação aparenta ser mais complicada que a Eq. (4.17) devido a assimetria do intervalo finito $[0, L]$. Para se entender isto, basta lembrar a Eq. (4.17) foi obtida considerando o deslocamento das partículas para a extremidade 0 do intervalo, enquanto a obtenção da Eq. (4.21) se considerou o deslocamento das partículas para a extremidade L . Se o intervalo fosse simétrico, digamos $[-L, L]$, a Eq. (4.17) teria a mesma forma que a Eq. (4.21), e a transição de uma equação para outra seria trivial. Apesar de serem diferentes, podemos obter a Eq. (4.17) da (4.21). De fato, suponha a situação ilustrada na Fig. 4.4(a), em que $v_1 > 0$ e $v_2 > 0$ são as velocidades das partículas após uma colisão AP incompleta particular e $\gamma < 1$. Trocando-se v_1 por $-v_2$, v_2 por $-v_1$ (regra de troca de velocidades) e γ por γ^{-1} , essa situação é descrita equivalentemente pela Fig. 4.4(b). Em vista disso, para obtermos a Eq. (4.17) da Eq. (4.21), devemos fazer as trocas:

1. α por β e β por α . Para vermos isto, considere a Fig. 4.5(a) com velocidades α e β ; aplicando a regra de troca de velocidades, temos que α é trocada por $-(-\beta) = \beta$ e β é trocada por $-(\alpha) = -\alpha$, resultando na situação da Fig. 4.5(b), ou seja, efetivamente, é uma permuta de α e β ;
2. x_0 por $L - x_0$ e $x_0^{(k)}$ por $L - x_0^{(k)}$, pois as extremidades do intervalo estão permutadas para as partículas (Figs. 4.5(a)-(b));
3. θ por $\pi - \theta$, que equivale a troca de γ por γ^{-1} ⁽¹⁾.

Os estados possíveis gerados segundo a Fig. 4.5(a) são equivalentes aos da Fig. 4.5(b). Para se demonstrar isto, se $z_0 = \alpha - \imath\beta$ for o estado inicial que gera o estado da Fig. 4.5(a), pela troca de velocidades do item 1, obtemos o estado inicial da Fig. 4.5(b), $\mathfrak{z}_0 = \beta - \imath\alpha$.

¹A troca de θ por $\pi - \theta$ equivale a definição de uma nova variável $\theta' = \pi - \theta$ associada à $\gamma' = \gamma^{-1}$. A relação $\theta' = \pi - \theta$ é obtida da seguinte maneira: $\cos \theta = \frac{1-\gamma}{1+\gamma} = \frac{\gamma^{-1}-1}{\gamma^{-1}+1} = -\cos \theta'$, ou seja, $\cos \theta + \cos \theta' = 0$. Para que $\theta \in (0, \pi)$ e $\theta' \in (0, \pi)$, a solução procurada deve ser $\theta = \pi - \theta'$.

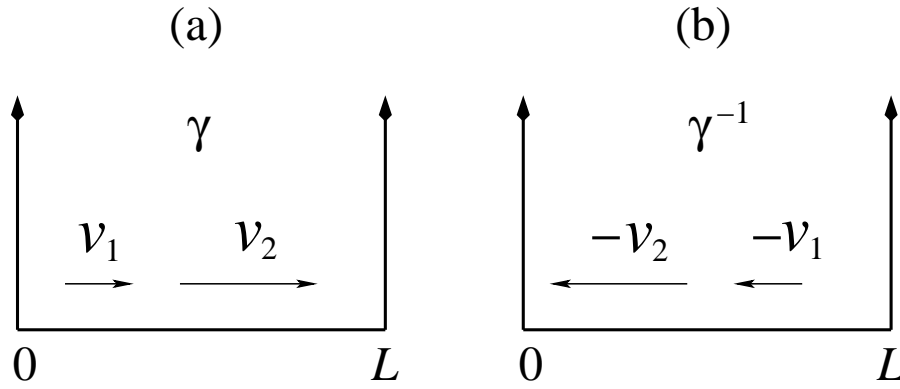


Figura 4.4: CCAPI com $\gamma < 1$ é equivalente às CCAPI com $\gamma^{-1} > 1$, contanto que se troque v_1 por $-v_2$, v_2 por $-v_1$.

A relação explícita entre esses estados é $z_0 = -i\bar{z}_0$. Esta regra aplicada ao estado pós-colisão, Fig. 4.5(d), gerado por $z_0 = \beta - i\alpha$, conduz ao estado pós-colisão, Fig. 4.5(c), gerado por $z_0 = \alpha - i\beta$. As Figs. 4.5(c)-(d) são as versões em velocidades normalizadas das Figs. 4.4(a)-(b).

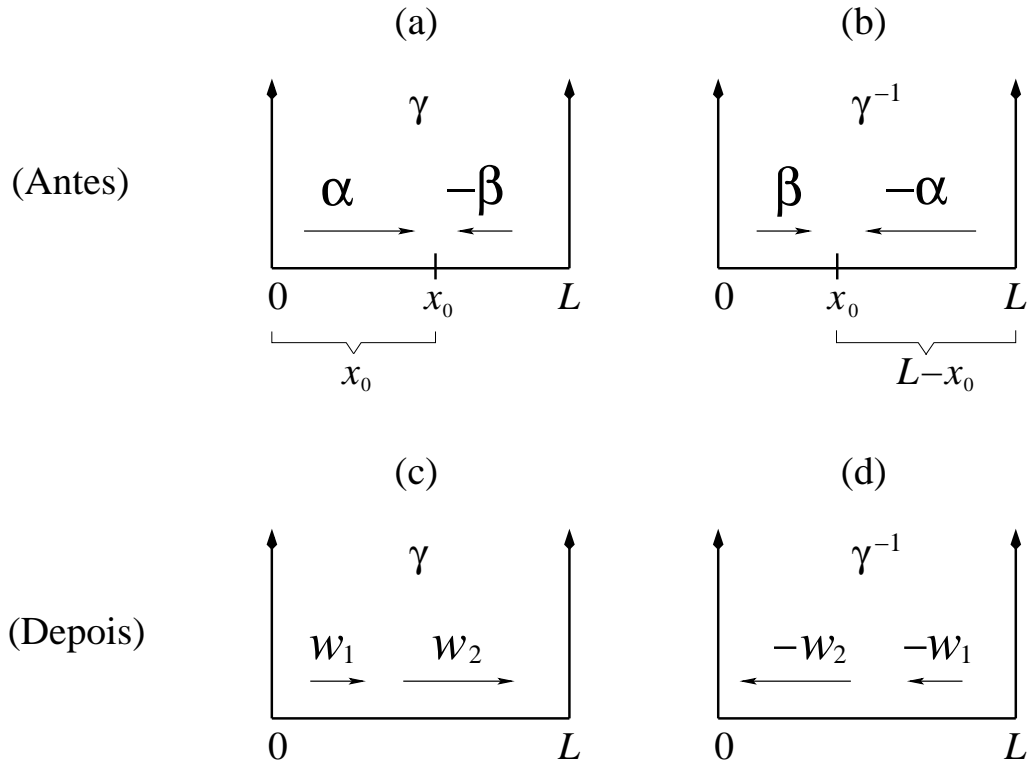


Figura 4.5: (a) Situação inicial nas CCAPI para $\gamma < 1$. (b) Situação inicial nas CCAPI para $\gamma^{-1} > 1$. (c) Situação pós-colisão de (a). (d) Situação pós-colisão de (b). Transita-se de (a) para (b) e de (c) para (d) fazendo-se as trocas mencionadas nos itens 1, 2 e 3 da página 56.

Considerando $z_0 = -\imath\bar{z}_0$ e a relação $\theta = \pi - \theta'$ nas Eqs. (4.9), conseguimos

$$z_{2k-1} = \imath z_{2k}, \quad z_{2k} = \imath z_{2k-1},$$

em que z_{2k-1} e z_{2k} são os estados possíveis da Fig. 4.5(a) e z_{2k} e z_{2k-1} , os estados possíveis da Fig. 4.5(b). Perceba que nesta generalização, os estados possíveis possuem uma defasagem em seus índices. Por exemplo, se a Fig. 4.5(d) corresponder a um estado $z_1 = -w_2 - \imath w_1$, para se obter o estado $w_1 + \imath w_2 = z_1$ da Fig. 4.5(c), antes devemos refletir a partícula na parede, dando $z_2 = w_2 - \imath w_1$, para termos, enfim, $z_1 = \imath z_2$.

Como conseguimos relacionar as posições de colisão e os estados possíveis nas duas situações das Figs. 4.4 e 4.5, é suficiente estudar apenas uma delas. Daqui em diante, arbitramos pelo caso associado a $\gamma > 1$ (ocasionalmente, quando for necessário, mencionaremos o caso $\gamma < 1$).

4.3 Relação entre CCP e CCAPI

Nas seções anteriores, analisamos as CCP e as CCAPI e identificamos que os valores de γ que asseguram a ocorrência de mais de uma colisão p-p paralela e antiparalela incompleta são aqueles tais que $\gamma \in (0, 3^{-1}) \cup (3, \infty)$. Além disso, mostramos também que esses dois intervalos são equivalentes entre si, no sentido de que os estados e as posições geradas em um intervalo podem ser representados equivalentemente no outro, mostrando que basta se considerar apenas um deles para se investigar a geração de estados. No intervalo faltante $[3^{-1}, 3]$ de razões das massas, predomina-se CCAPC, como mostram os gráficos das Figs. 3.10-3.12. Nesta seção, vamos mostrar que CCAPI geram CCP, mas CCP não geram CCAPI, de modo que os estados de CCP complementam os estados de CCAPI. Isto quer dizer que basta estender o intervalo de valores dos índices k das equações dos estados z_{2k-1} e z_{2k} válidas para as CCAPI às mesmas equações válidas para as CCP (adiante explicitaremos esta extensão). Isto define um conjunto finito de estados para essas duas colisões consecutivas pois, já individualmente, são finitos também.

Vamos mostrar agora que CCP não geram CCAPI usando-se um mesmo conjunto de equações geradoras de estados. Suponha que as partículas iniciem CCP próximo da extremidade 0 do intervalo finito com velocidades iniciais tais que $0 < v_2^{(0)} < v_1^{(0)}$ e o estado inicial $z_0 = \alpha + \imath\beta$. Neste caso, a partícula **1** perde energia cinética para a **2** em cada colisão até que a partícula **1** fique mais lenta que a partícula **2** (estado z_{2N-1} na Fig. 4.6(a)). Em cada uma dessas colisões, as posições de colisão se aproximam da extremidade

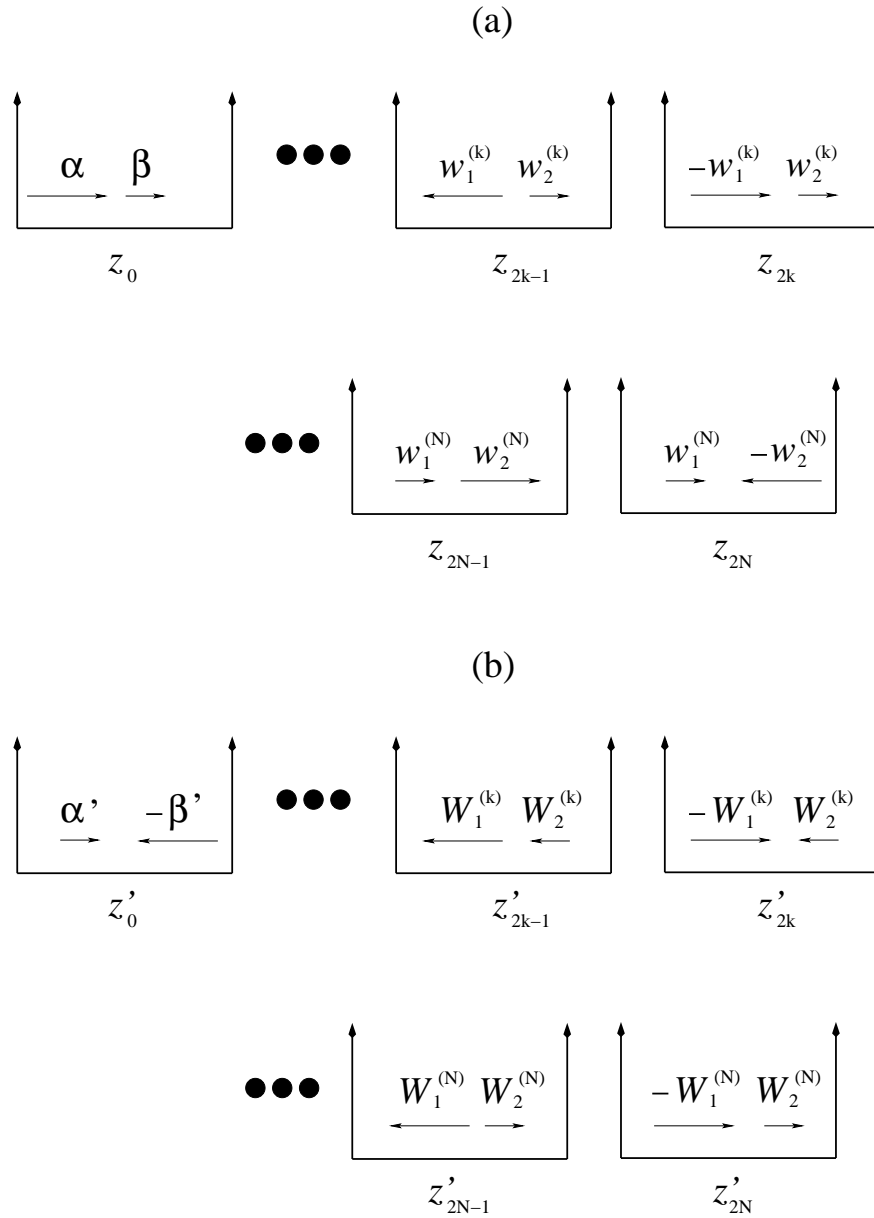


Figura 4.6: (a) CCP com estado inicial $z_0 = \alpha + \imath\beta$ gerando estados $(w_1^{(k)}, w_2^{(k)})$; (b) CCAPI com estado inicial $z'_0 = \alpha' + \imath\beta'$ gerando estados $(W_1^{(k)}, W_2^{(k)})$.

L do intervalo.

Em seguida, a partícula **2** colidirá com a parede, gerando o estado z_{2N} e dando início as CCAPI. Então, definimos $\alpha' = w_1^{(N)}$ e $\beta' = w_2^{(N)}$ para o estado inicial $z'_0 = \alpha' - \imath\beta'$, Fig. 4.6(b). Agora, em cada colisão AP incompleta, a partícula **1** ganhará energia cinética e a **2** perderá energia cinética até se inverter o sentido da velocidade da **2**, gerando uma configuração de movimento paralela. Em cada colisão AP incompleta, as posições de colisão se aproximam da extremidade 0 do intervalo.

Em vista disso, para o último estado gerado por colisão paralela ($k = N$), $z_{2k-1} =$

$(-1)^{k+1}e^{ik\theta}\overline{z_0}$, temos, $w_1^{(2k-1)} > 0$ e $w_2^{(2k-1)} > 0$, com $v_1^{(2k-1)} < v_2^{(2k-1)}$. Dessa forma, o estado z_{2k} será

$$z_{2k} = \overline{z_{2k-1}} = (-1)^{k+1}e^{-ik\theta}z_0,$$

ao invés de

$$z_{2k} = -\overline{z_{2k-1}} = (-1)^ke^{-ik\theta}z_0.$$

Isto significa que há uma mudança da regra na geração de estados quando se transita de CCP para CCAPI (veja a Fig. 4.9 para um caso particular).

Agora mostremos que as CCAPI geram CCP através do mesmo conjunto de equações geradoras de estados. Isso corresponde a situação representada pela Fig. 4.6(b) se ocorrer antes daquela da Fig. 4.6(a). Sendo $z'_0 = \alpha' - i\beta'$, e admitindo que z'_{2k-1} seja o estado da última colisão antiparalela incompleta ($k = N$), temos $W_1^{(k)} < 0$ e $W_2^{(k)} > 0$, ao invés de $W_2^{(k)} < 0$. Assim, supondo que a **1** alcance a **2**, ocorrerá a primeira CCP, cujo estado z'_{2k} será

$$z'_{2k} = -\overline{z'_{2k-1}} = (-1)^ke^{-ik\theta}z'_0,$$

ou seja, a regra de geração de estados se mantém na transição de CCAPI para CCP. Por conseguinte, definimos $z'_{2k} = z_0$, e as equações geradoras de estados CCAPI geram também estados das CCP da Fig. 4.6(a). Portanto, as sequências de CCAPI e CCP formam um ciclo de colisões consecutivas com estado inicial z'_0 . Como os estados de CCAPI e CCP são complementares, denotemos os estados das CCP da mesma maneira que os estados das CCAPI, e definimos $k \in [1, N-1]$ para CCAPI e $k \in [N, 2N-1]$ para CCP. O intervalo de valores de k para CCP deveria ser, à primeira vista, $k \in [N, 2N-2]$, mantendo-se o mesmo comprimento que o intervalo $[1, N-1]$. Isso seria verdade se pensarmos nas CCP e CCAPI com índices k independentes, na qual a primeira colisão das CCP não é considerado nos valores de k . A junção de CCAPI com CCP incorpora a primeira colisão CCP, unindo os seus índices k . Assim, o último estado e a última posição de colisão são z_{2N-2} e $x_0^{(N-1)}$ nas CCAPI e $z_{2(2N-1)} = z_{4N-2}$ e $x_0^{(2N-1)}$ nas CCP.

Os exemplos a seguir ilustram essa análise para os casos $N = 2$ e $N = 4$.

Exemplo 4: Análise do ciclo de CCAPI-CCP para $N = 2$, Fig. 4.7.

Suponha inicialmente as CCAPI separadas das CCP. Entre parênteses nos referimos às CCP. Como $N = 2$, as partículas com estado z_0 (z'_0) colidem entre si em x_0 (x_0) gerando o estado z_1 (z'_1). A **1** é refletida na parede e colide com a **2** em $x_0^{(1)}$ ($x_0^{(1)}$), gerando o estado z_3 (z'_3) cessando as CCAPI (CCP). Agora, no ciclo de CCAPI-CCP, a etapa inicial das CCP, dada pelo estado z'_0 e posição x_0 , corresponde a etapa dada pelo estado z_4 e posição $x_0^{(2)}$, e assim por diante. Portanto, podemos trocar a representação das CCP individualmente por

uma representação que seja uma continuidade nas colisões consecutivas. Na Fig. 4.7 fica evidente que a etapa inicial das CCP é incorporada na indexação das colisões consecutivas do ciclo. Então, nas CCAPI, a última posição de colisão é $x_0^{(1)} = x_0^{(N-1)}$ e o último estado das CCAPI é $z_2 = z_{2N-2}$. O estado z_3 transita as CCAPI para as CCP; z_4 é o primeiro estado e $x_0^{(2)}$ é a primeira posição das CCP; e os últimos são $z_6 = z_{4N-2}$ e $x_0^{(3)} = x_0^{(2N-1)}$.

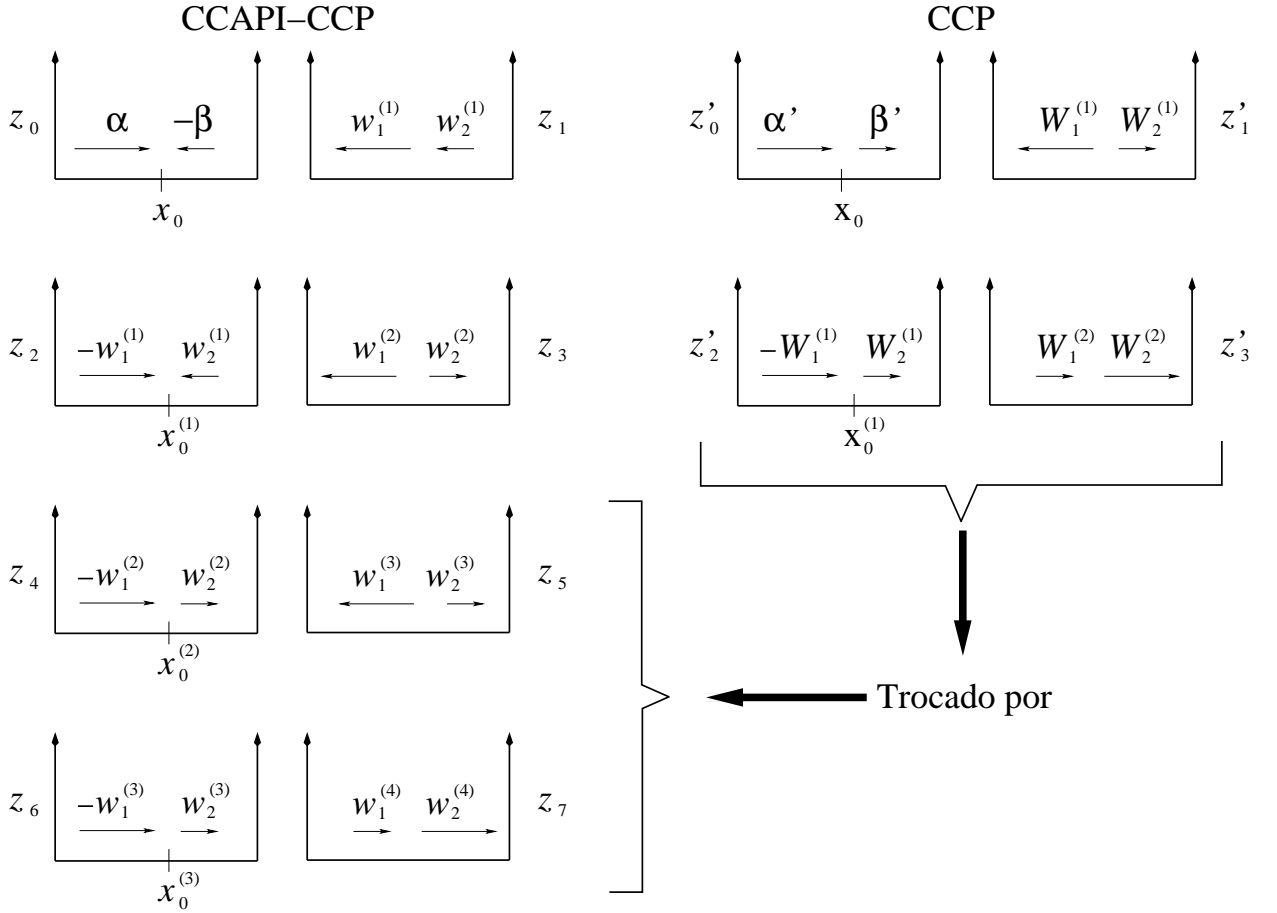


Figura 4.7: Representação do ciclo CCAPI-CCP para $N = 2$: redefinindo os valores de k nas CCP, integra-se as CCP às CCAPI, formando um ciclo de colisões consecutivas.

Exemplo 5: Aproveitando o exemplo 3, construímos uma tabela que sumariza os estados possíveis para o ciclo CCAPI-CCP para $N = 4$. Consequentemente, as Eqs. (4.1),

$$z_{2k-1} = (-1)^{k+1} e^{ik\theta} \overline{z_0}, \quad z_{2k} = (-1)^k e^{-ik\theta} z_0,$$

são válidas para as CCAPI e CCP. A Fig. 4.8 mostra uma regularidade nas representações das CCAPI, Figs. 4.8(a)-(f), e das CCP, Figs. 4.8(g)-(l). Como $z_0 = \alpha - i\beta$, o estado inicial se encontra no 4º quadrante. A colisão p-p gera o estado z_1 no 3º quadrante; a colisão p-w da 1 o reflete em relação ao eixo w_2 , gerando z_2 , e assim por diante. Esse processo aproxima os estados ao eixo w_1 . Cessando as CCAPI, iniciam-se as CCP. A

k	Estado Ímpar	Estado Par	Posição de Colisão
		z_0	x_0
1	z_1	z_2	$x_0^{(1)}$
2	z_3	z_4	$x_0^{(2)}$
3	$z_5 = z_{2N-3}$	$z_6 = z_{2N-2}$	$x_0^{(3)} = x_0^{(N-1)}$
4	z_7	z_8	$x_0^{(4)}$
5	z_9	z_{10}	$x_0^{(5)}$
6	z_{11}	z_{12}	$x_0^{(6)}$
7	$z_{13} = z_{4N-3}$	$z_{14} = z_{4N-2}$	$x_0^{(7)} = x_0^{(2N-1)}$

Tabela 4.2: Estados e posições geradas no ciclo CCAPI-CCP para $N = 4$.

transição para as CCP podem ocorrer de 2 maneiras distintas, embora representemos apenas a primeira delas, por ser a mais simples:

1. Transição 1: após a colisão p-p, a **1**, com velocidade negativa, continua mais rápida que a **2**, com velocidade positiva. O estado de transição para as CCP encontra-se no 2º quadrante, o qual será refletido em relação ao eixo w_2 ; o estado resultante é o primeiro estado das CCP. Daqui em diante, o procedimento é o mesmo ao descrito nas CCAPI. Nesse processo, os estados se aproximam do eixo w_2 ;
2. Transição 2: a **2**, com velocidade positiva, sai mais rápida que a **1**, a qual pode ter velocidade negativa ou positiva: se sua velocidade for negativa, o estado de transição está no 2º quadrante. Se ambas as partículas colidirem com as paredes, esse estado será deslocado de π rad, localizando-se no 4º quadrante, favorecendo o início de novas CCAPI antes das CCP. Agora, se apenas a **2** colidir com a parede e ocorrer uma colisão p-p, independentemente se a velocidade da **1** for negativa ou positiva, favorece-se novamente o início de CCAPI antes de CCP, pois o estado resultante estará no 4º quadrante.

A Fig. 4.9 representa os gráficos das velocidades normalizadas das partículas em função do número de colisões para o caso $\gamma = 150$, para a qual $N = 10$. A linha preta refere-se à partícula **1** e a vermelha, à partícula **2**. A partir das condições iniciais de posição e velocidades citadas no início do capítulo, cada uma das partículas colide com as paredes e colidem entre si, saindo após a colisão com velocidades negativas (veja o primeiro ponto do gráfico da Fig. 4.9(b)), iniciando-se as CCAPI. Observe que as velocidades da **1** se alternam em valores negativos e positivos por causa da reflexão da **1** com a parede em 0, enquanto a velocidade da **2** permanece constante, como se pode ver pelos pequenos patamares no gráfico. A velocidade da **2** diminui gradativamente até se tornar positiva,

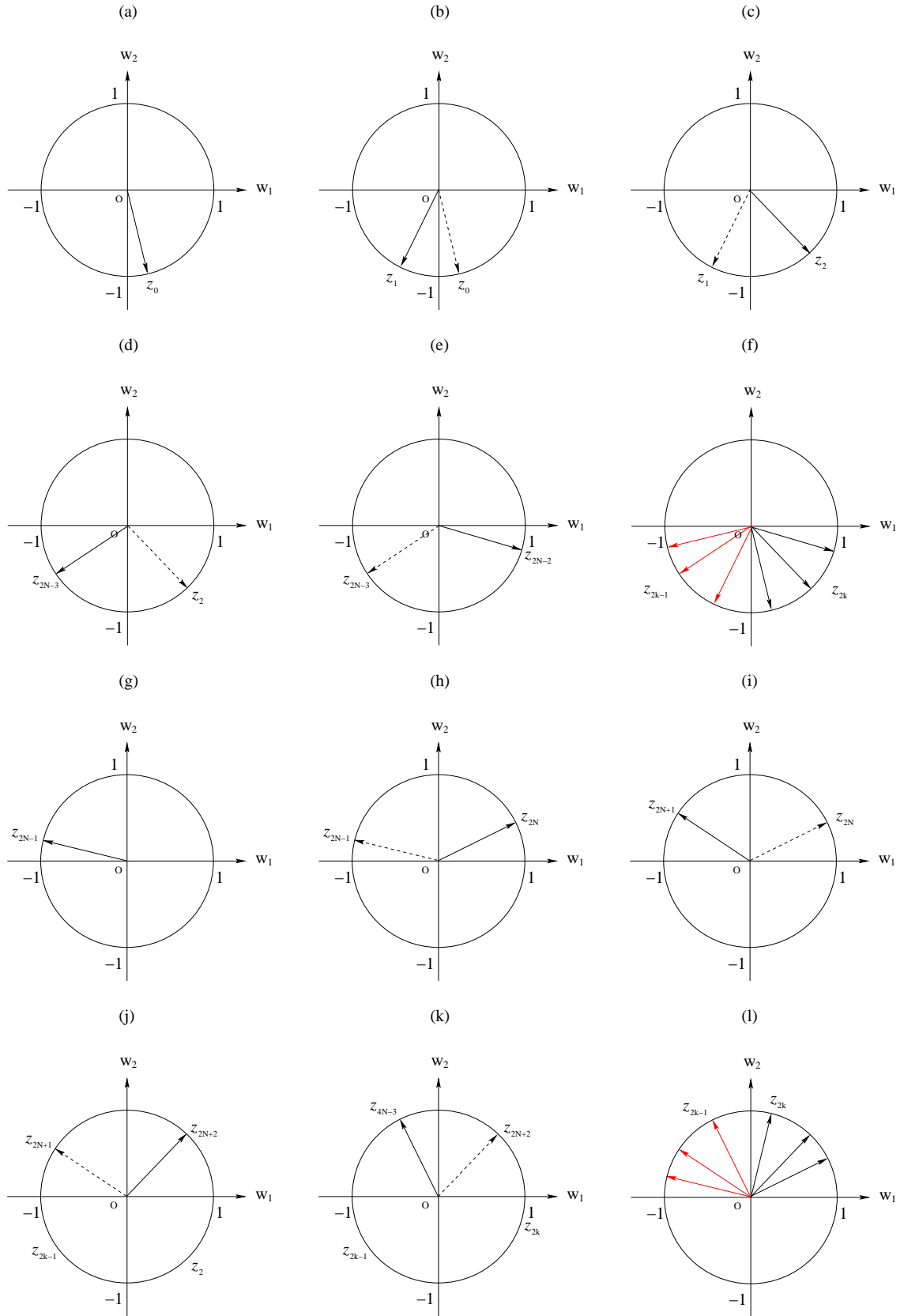


Figura 4.8: Representação no Espaço de Estado das: (a)-(f) CCAPI; (g)-(l) CCP. As figuras (f) e (l) são as representações simultâneas dos estados dos itens anteriores.

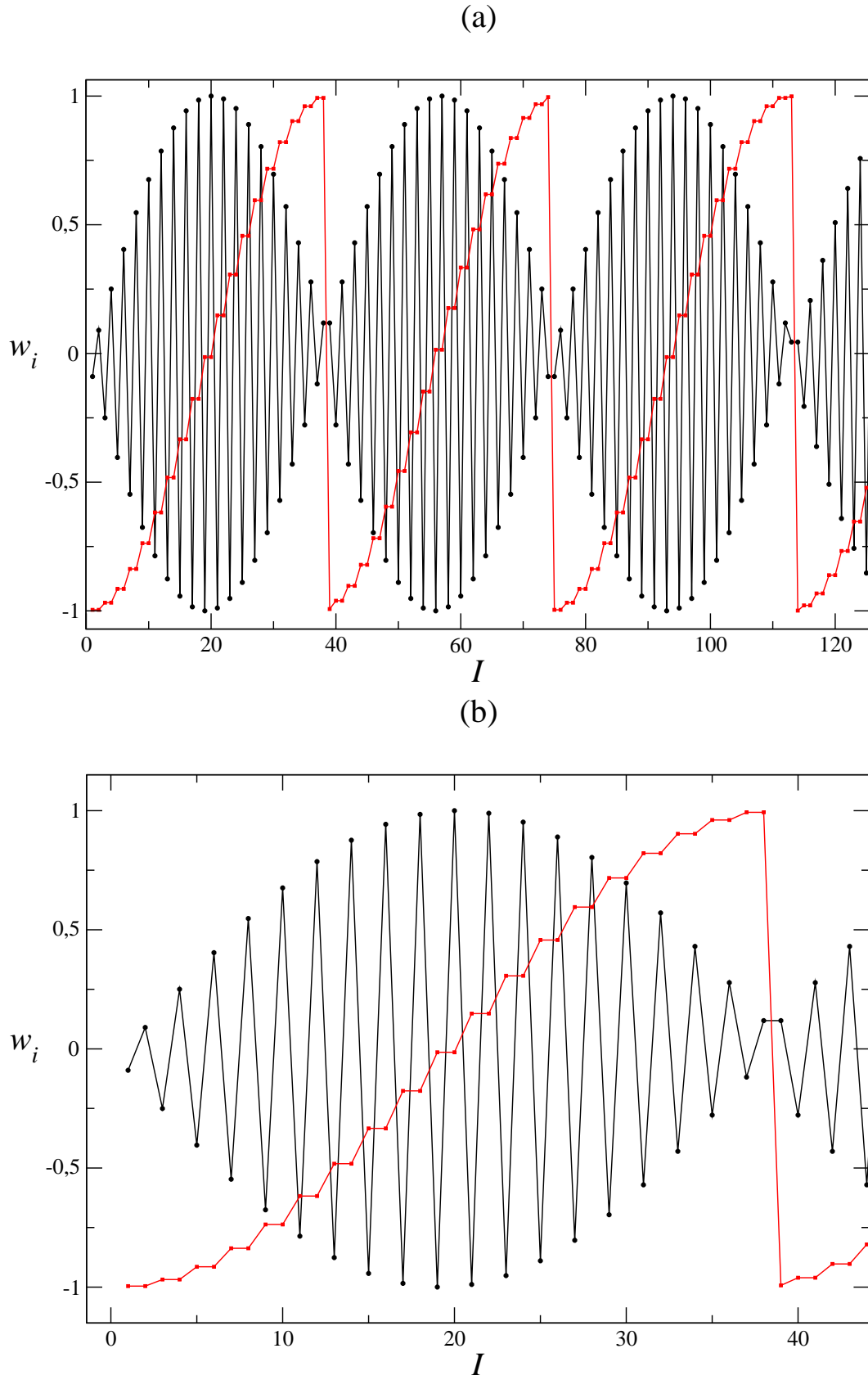


Figura 4.9: Velocidades normalizadas para o caso $\gamma = 150$ da partícula 1 (linha preta) e da partícula 2 (linha vermelha). O gráfico (b) é a ampliação do gráfico (a).

momento este onde a **2** inverte o sentido do seu movimento, que é a transição de CCAPI para CCP, sem nenhuma “descontinuidade” ou “salto” nas curvas subjacentes. Daqui em diante, a velocidade da **1** diminui e da **2** aumenta gradativamente até que a **2** colida com a parede, cessando as CCP. Neste momento, a velocidade da **2** “salta” de um valor positivo para um negativo repentinamente. Esta é a manifestação da descontinuidade na regra de geração de estados que mencionamos. Esse gráfico mostra também que as CCAPI e CCP formam um conjunto finito de estados e cada um deles é diferente entre si. Isto é esperado, pois os estados correspondem a rotações sucessivas, que são bijeções no intervalo $[0, 2\pi)$. Após ter se completado um ciclo de CCAPI-CCP, com a reflexão da **2** na parede, inicia-se um novo ciclo de CCAPI-CCP. Agora temos que distinguir o caso no qual $\frac{\theta}{\pi}$ é racional daquele que é irracional. No caso de $\frac{\theta}{\pi}$ racional, sabemos que geram-se um número finito de estados. No entanto, é possível que não se gere todos os estados possíveis no primeiro ou em algum ciclo qualquer de CCAPI-CCP, pois as configurações de movimento das partículas que propiciam a geração de novos estados também depende das suas velocidades e das posições de colisão, restringindo, de alguma forma, nas rotações possíveis dentro de um desses ciclos. Então, é prudente considerar o conjunto de estados gerados em cada ciclo de CCAPI-CCP como subconjunto de um conjunto finito de todos os estados possíveis. A varredura por todas as rotações possíveis é realizada nas transições de um CCP para um CCAPI. Agora, no caso $\frac{\theta}{\pi}$ irracional, podemos considerar que os conjuntos de estados possíveis sejam subconjuntos de um conjunto infinito de estados, uma vez que correspondem a rotações irracionais na circunferência unitária. A questão que surge aqui é se o sistema gera, ou não, infinitos subconjuntos de maneira a corresponder ao conjunto de todos os estados possíveis. Esta é outra perspectiva do problema sobre a ergodicidade para este sistema. Veremos adiante que a transição entre subconjuntos distintos de estados de cada ciclo de CCAPI-CCP é extremamente difícil.

Tratemos agora das posições de colisão. Como visto, os estados gerados pelas CCP são obtidas estendendo-se o índice k de N a $2N - 1$ nas equações geradoras de estados. Ora, como a equação das posições de colisão nas CCAPI, Eq. (4.17), foi obtida da Eq. (4.1) e esta vale para CCP, então basta usar esta mesma extensão do índice k na Eq. (4.17) para se obter as posições $x_0^{(k)}$ de colisão para CCP.

Obtemos numericamente as posições de colisão para o caso discutido da Fig. 4.9: tomando-se arbitrariamente como referência a extremidade 0 do intervalo $[0, 1]$, a Fig. 4.10(a) mostra que, à medida que as partículas colidem entre si, as posições de colisão se aproximam e se afastam em relação à parede em 0 em várias sequências locais (em uma sequência de aproximação-afastamento individual de posições de colisão). Es-

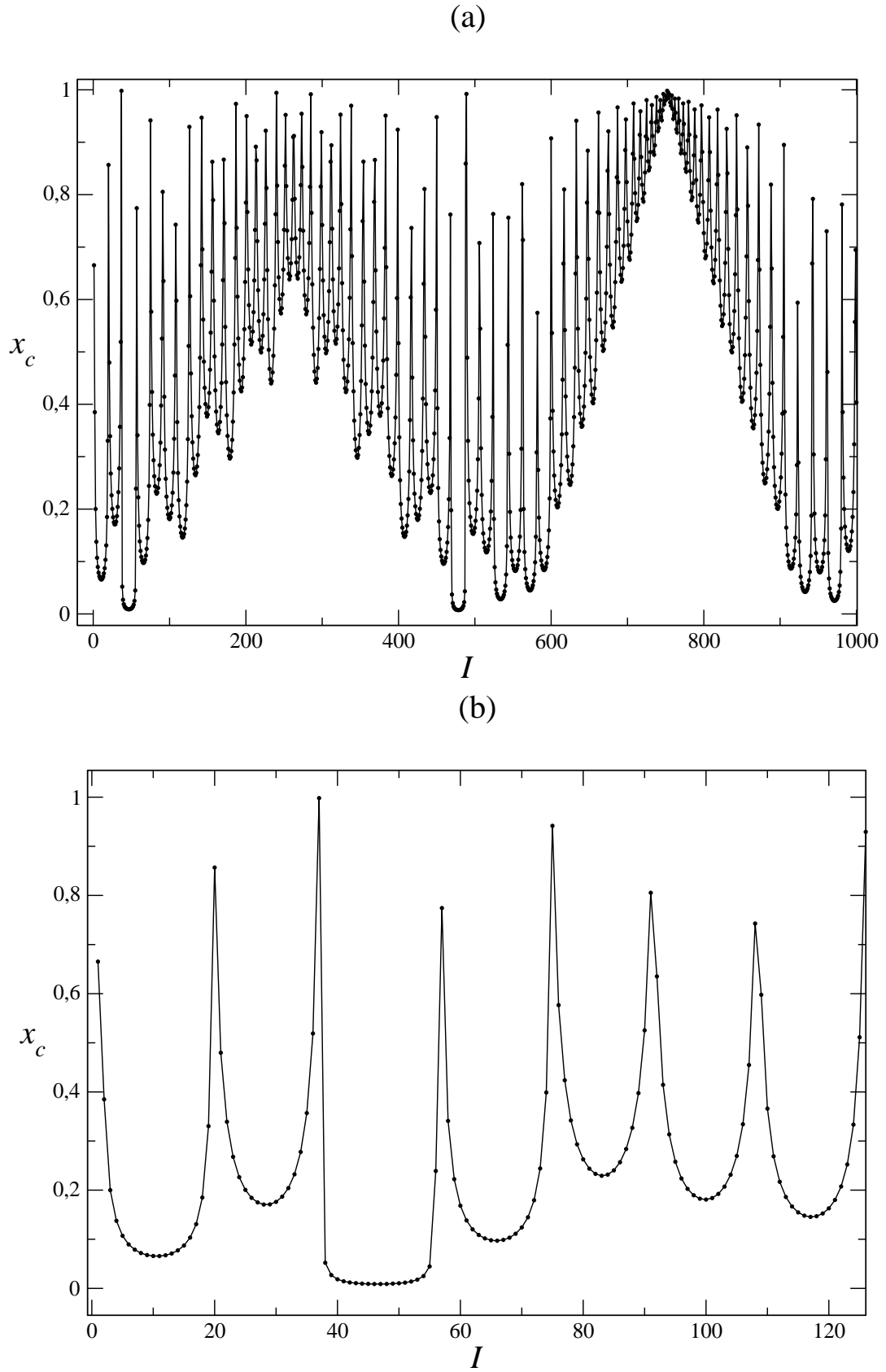


Figura 4.10: Posições de colisão para $\gamma = 150$: (a) o conjunto de seqüências de colisões se aproxima das extremidades do intervalo $[0, 1]$, embora (b) as posições de colisão se afastam e se aproximam em cada seqüência de colisões p-p.

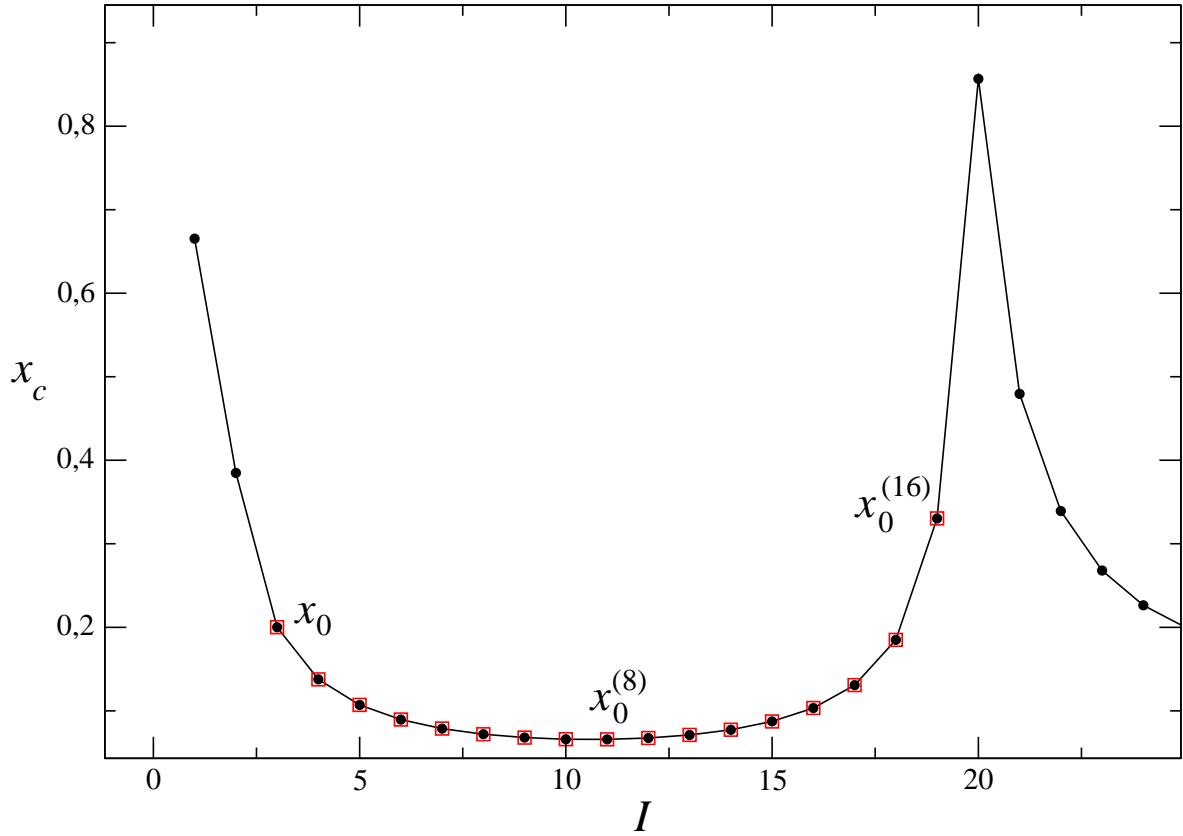


Figura 4.11: Versão ampliada do gráfico da Fig. 4.10(b) para a primeira sequência de colisões. Os destaques representados por quadrados são os valores obtidos pela Eq. (4.17) e os pontos círculos, as posições obtidas numericamente.

tes afastamentos e aproximações são reproduzidas globalmente (ou seja, em um conjunto de sequências de aproximação-afastamento de posições de colisão). A Fig. 4.10(b) mostra uma visualização ampliada de algumas dessas sequências. Escolhemos a primeira sequência, Fig. 4.11, para a discussão. O primeiro ponto corresponde à posição inicial $x_c(1) = 0,6653$, onde as partículas partem com velocidades $v_1(1) = -4,50$ e $v_2(1) = 4,07$, são refletidas nas paredes e colidem antiparalelamente entre si em $x_c(2) \approx 0,3849$. Após esta colisão, ambas as partículas saem com velocidades negativas. A **1** é refletida na parede e colidirá com a **2** em $x_c(3) \approx 0,2001 = x_0$, iniciando-se as CCAPI, cuja última posição de colisão é $x_0^{(8)} = 0,06598584559\dots$. A $x_0^{(9)} \approx 0,0675$ é a primeira posição de colisão das CCP e geram-se mais 6 posições de colisão, sendo $x_0^{(16)} \approx 0,3304$ o último. Porém, pela Eq. (4.16), há $N = 10$ CCAPI e, assim, o último estado é o de índice $N - 1 = 9$ e a última posição de colisão correspondente é $x_0^{(k)} = x_0^{(9)}$. Não há nenhum conflito entre as previsões teóricas e numéricas porque a estimativa de N refere-se ao número máximo possível de colisões consecutivas, ou seja, o número de colisões consecutivas pode ser inferior ao da estimativa. Implicitamente, a estimativa de N nos informa quantos estados cabem, no máximo, em um dos quadrantes do Espaço de Estado (veja as Figs. 4.8(f) e (l)). Então,

para a situação da Fig. 4.8(a), à medida que escolhamos estados iniciais mais próximos do eixo w_1 , menos estados caberão nos quadrantes, reduzindo-se o número de CCAPC. Para as CCP, o número de colisões consecutivas depende, além da escolha do estado inicial, também das posições de colisão p-p, pois a **2**, mais lenta, pode estar perto o bastante da parede, impedindo que seja alcançada paralelamente pela **1**, ocorrendo, ao invés, uma colisão antiparalela completa.

4.4 Colisões Consecutivas Antiparalelas Completas (CCAPC)

Imaginemos que nosso sistema apresente Colisões Consecutivas Antiparalelas Completas (CCAPC), ou seja, entre duas colisões p-p subsequentes, ambas as partículas colidem com as paredes. Aqui, supondo as partículas partindo de uma certa posição x_0 com velocidades $v_1^{(a)} < 0$ e $v_2^{(a)} > 0$ temos duas possibilidades:

- **P1: as partículas chegam às paredes simultaneamente.**

Considerando a partida das partículas em uma posição x_0 em sentidos opostos, $v_1^{(a)} < 0$ e $v_2^{(a)} > 0$, e impondo que as partículas alcancem as paredes simultaneamente, a posição para que isto aconteça é

$$x_0 = \frac{v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} \quad \text{ou} \quad x_0 = \frac{w_1^{(a)} \sin \frac{\theta}{2}}{w_1^{(a)} \sin \frac{\theta}{2} - w_2^{(a)} \cos \frac{\theta}{2}}, \quad (4.22)$$

em que $w_i^{(a)}$ são velocidades normalizadas. Assim, as partículas são refletidas pelas paredes e colidem em x_0 novamente. Impondo às equações de colisões p-p que as velocidades após a colisão sejam as mesmas das iniciais, $v_1^{(d)} = v_1^{(a)}$ e $v_2^{(d)} = v_2^{(a)}$, concluímos que isto é possível apenas se

$$\frac{-v_1^{(a)}}{v_2^{(a)}} = \gamma \quad \text{ou} \quad \frac{-w_1^{(a)}}{w_2^{(a)}} = \sqrt{\gamma}. \quad (4.23)$$

Isto significa que, independente das massas das partículas, apenas dois estados são gerados, $(v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$ e $(-v_1^{(a)}, -v_2^{(a)})$. Este é um exemplo trivial de CCAPC com apenas dois estados possíveis, z_0 e $-z_0$. Note que a Eq. (4.23) é simplesmente a velocidade do centro de massa nula do sistema. Esta situação na qual se limita o número de estados possíveis, denominamos de *degenerescência de estados*. Na representação no bilhar triângulo retângulo, esta condição corresponde, conforme a Eq. (4.23), à saída da partícula na direção ξ tal que $\text{tg } \xi = \sqrt{\gamma^{-1}}$ (flecha vermelha na Fig. 4.12) do ponto A (correspondendo à posição

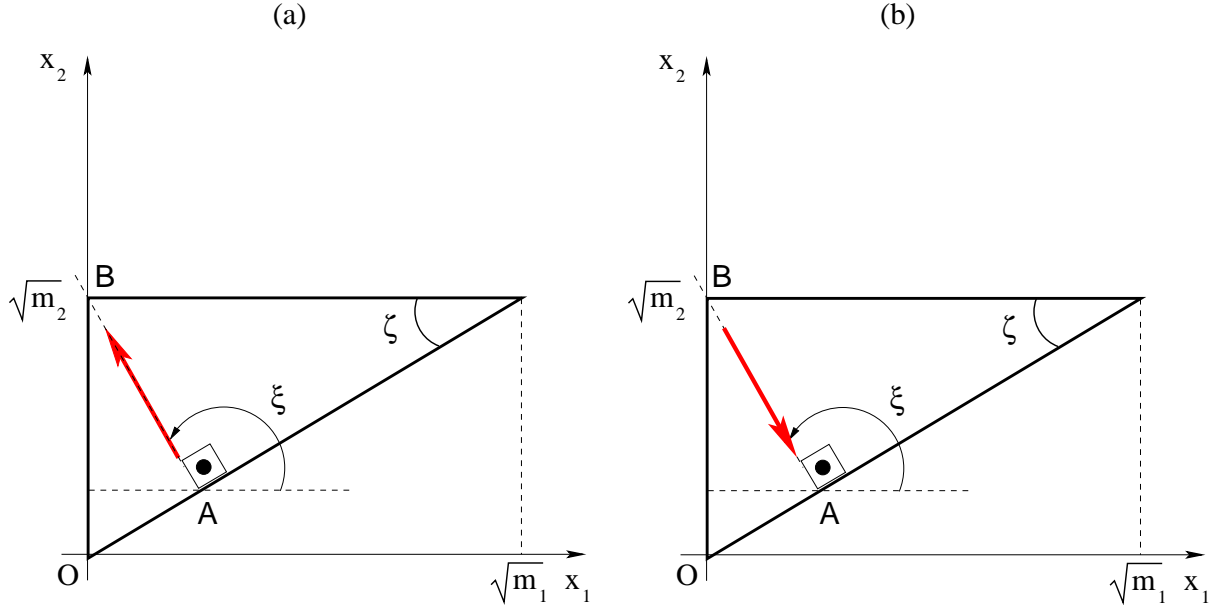


Figura 4.12: Representação no bilhar triângulo retângulo quando as colisões p-w das partículas ocorrerem simultaneamente.

x_0) ao ponto B (correspondendo às posições de colisões p-w simultâneas). Portanto, por construção geométrica, a partícula parte ortogonalmente em relação à hipotenusa ao vértice de ângulo reto do bilhar. Neste vértice, a partícula é refletida por π rad, retornando ao ponto A (a partir das paredes, ambas as partículas colidem na mesma posição de colisão x_0), gerando uma trajetória periódica trivial.

- **P2:** as partículas não chegam simultaneamente às paredes.

Considere que as partículas partam em sentidos opostos de uma mesma posição y_0 , em que $y_0 \neq x_0$ (veremos adiante que há apenas duas posições de colisão quando o centro de massa imediatamente antes de uma colisão p-p estiver em repouso), e colidam com as paredes não mais simultaneamente. Logo, as CCAPC não são mais permanentes, como visto no caso anterior, dando lugar a uma colisão P em algum instante na dinâmica do sistema. Determinemos, então, as velocidades possíveis e as posições de colisão.

Com respeito às velocidades, vimos na discussão da Fig. 3.10(c), página 43, que a cada 2 colisões AP completas, gera-se novamente o estado inicial, ou seja, as mesmas velocidades iniciais. Os estados possíveis imediatamente antes e depois de uma colisão p-p são $(-v_1^{(a)}, -v_2^{(a)})$, $(v_1^{(d)}, v_2^{(d)})$, $(-v_1^{(d)}, -v_2^{(d)})$ e $(v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$. Como as partículas não chegam simultaneamente nas paredes, geram-se mais 2 estados imediatamente depois de uma colisão p-w, totalizando 6 estados. A Tabela 4.3 sumariza as etapas de colisões p-p e p-w para as CCAPC começando com o estado $(v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$.

	Situação	Estado
L1	Estado inicial	$(v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$
L2	Colisão p-w da 1 ou colisão p-w da 2	$(-v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$ ou $(v_1^{(a)}, -v_2^{(a)})$
L3	Colisão p-w da 2 ou colisão p-w da 1	$(-v_1^{(a)}, -v_2^{(a)})$
L4	Colisão p-p	$(v_1^{(d)}, v_2^{(d)})$
L5	Colisão p-w da 1 ou colisão p-w da 2	$(-v_1^{(d)}, v_2^{(d)})$ ou $(v_1^{(d)}, -v_2^{(d)})$
L6	Colisão p-w da 2 ou colisão p-w da 1	$(-v_1^{(d)}, -v_2^{(d)})$
L7	Colisão p-p	$(v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$

Tabela 4.3: Estados gerados nas CCAPC. O sistema gerará apenas esses estados se o centro de massa estiver em repouso imediatamente antes e depois após cada colisão p-p.

As posições possíveis nas CCAPC são obtidas iterativamente através das equações horárias das posições das partículas, com a imposição de ambas colidirem com as paredes nas colisões p-p subsequentes, ou seja, a partir de uma posição inicial y_0 , determinamos a posição de colisão y_1 ; considerando esta posição como uma nova posição inicial, obtemos a posição y_2 , e assim por diante. Como resultado da iteração deste procedimento, observamos que as posições de índices par e ímpar subsequentes são dependentes nas colisões AP completas, e são dadas por

$$y_{2k} = 2k\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) + y_0, \quad y_{2k+1} = \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_{2k}, \quad (4.24)$$

com

$$\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) = -\frac{2(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})}, \quad (4.25)$$

ou, em velocidades normalizadas,

$$y_{2k} = 2k\mathcal{F}(\theta, w_1^{(a)}, w_2^{(a)}) + y_0, \quad y_{2k+1} = 2X_0 - y_{2k}, \quad (4.26)$$

com

$$\mathcal{F}(\theta, w_1^{(a)}, w_2^{(a)}) = -\frac{w_1^{(a)} \cos \frac{\theta}{2} + w_2^{(a)} \sin \frac{\theta}{2}}{w_1^{(a)} \sin \frac{\theta}{2} - w_2^{(a)} \cos \frac{\theta}{2}} \sin \theta, \quad X_0 = \frac{w_1^{(a)} \sin \frac{\theta}{2}}{w_1^{(a)} \sin \frac{\theta}{2} - w_2^{(a)} \cos \frac{\theta}{2}},$$

contanto que $0 < y_{2k} < 1$ e $0 < y_{2k+1} < 1$. Perceba que a função $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$ ⁽²⁾ está associada à razão entre a velocidade do centro de massa e a velocidade relativa iniciais. Além disso, como a velocidade relativa inicial é de afastamento, $v_1^{(a)} - v_2^{(a)} < 0$; então, pela Eq. (4.25), a função $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$ tem o mesmo sinal da velocidade do centro de

²Note que $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$ é constante nas equações para as posições y_{2k} e y_{2k+1} . Optamos pela representação funcional simplesmente para deixar evidente os parâmetros importantes do sistema.

massa.

As posições de colisão nas CCAPC se alternam conforme o índice das Eqs. (4.24) (ou as Eqs. (4.26)), de maneira que, em algum instante, as partículas colidem mais perto de uma parede e, no instante seguinte, a colisão p-p ocorre mais perto da outra parede. Contudo, como as Eqs. (4.24) são funções lineares do inteiro $2k$, as posições de colisão apenas pares, ou apenas ímpares, seguem um padrão linear. Ademais, para $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$ ($\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < 0$), os pontos gerados por y_{2k} pertencem a uma reta crescente (decrecente) e os da y_{2k+1} , a uma reta decrescente (crescente).

Se o centro de massa estiver em repouso imediatamente antes da colisão p-p ⁽³⁾, então, pela Eq. (4.25), $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) = 0$, reduzindo as Eqs. (4.24) para

$$y_{2k} = y_0, \quad y_{2k+1} = 2x_0 - y_0, \quad (4.27)$$

ou seja, há apenas duas posições de colisão AP completa possíveis. Isto acontecerá enquanto $0 < y_{2k+1}$. Ainda, se $y_0 = x_0$, então a posição de colisão será única, $y_k = x_0$, para todo k inteiro, recuperando a primeira possibilidade. A representação no bilhar triângulo retângulo do resultado dado pelas Eqs. (4.27), Fig. 4.13, revelam também uma trajetória periódica: começando no ponto A (as partículas partem em direções opostas até as paredes), a partícula é refletida em B (colisão p-w da 1), depois em C (colisão p-w da 2) e chega em D (colisão p-p), onde é refletida por um ângulo de π rad; então a partícula retorna ao ponto A pelo mesmo caminho, completando um período da trajetória. Este é outro exemplo de como conseguir a degenerescência de estados, independente da razão das massas, e uma sequência infinita de CCAPC. Note que recuperamos a Fig. 4.12 da Fig. 4.13 com a identificação $A \equiv D$ e $B \equiv C$. Outra condição que leva a trajetórias periódicas é aquela onde a partícula no bilhar triângulo retângulo parte ortogonalmente em relação a um dos catetos, correspondendo no sistema de 2 partículas a uma delas estar inicialmente em repouso [33, 35]. Não abordaremos este caso aqui.

A substituição de y_{2k+1} , dada pela Eq. (4.24), no intervalo $0 < y_{2k+1} < 1$, nos dá

$$\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} < y_{2k} < \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}, \quad (4.28)$$

que é a condição sobre y_0 para que y_{2k} e y_{2k+1} sejam posições de colisão AP completas. Consequentemente, para iniciar as CCAPC, é necessário que a posição de colisão inicial

³Essa ressalva se justifica porque a não simultaneidade das colisões p-w desloca o centro de massa das partículas imediatamente depois de colidirem com as paredes, conforme as situações dadas por L2 e L5 da Tabela 4.3.

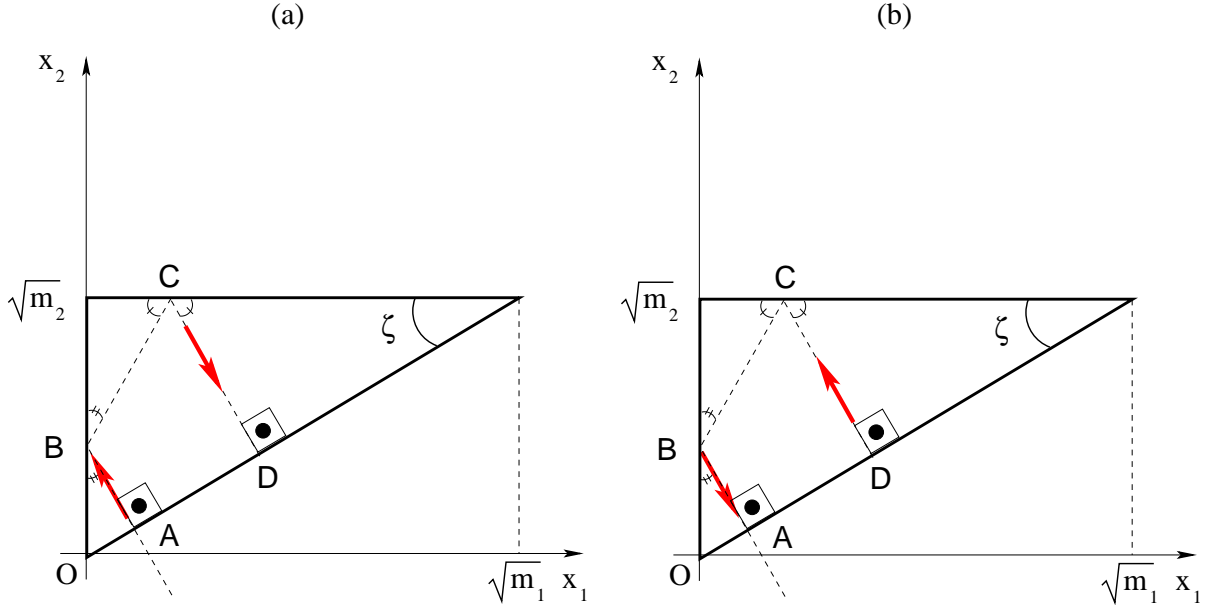


Figura 4.13: Representação no bilhar triângulo retângulo quando as colisões p-w das partículas não ocorrerem simultaneamente.

y_0 seja tal que

$$\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} < y_0 < \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}. \quad (4.29)$$

Esta relação permite inferir alguns resultados interessantes. Sendo $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} = \eta v_2^{(a)}$, temos para:

1. $\eta = 0$, $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} = 0$; logo, pela Eq. (4.22), a condição (4.29) fica

$$\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} < y_0 < \frac{2\gamma}{\gamma + 1}, \quad (4.30)$$

ou seja, a razão das massas das partículas determinam as posições iniciais que conduzem as CCAPC. Por exemplo, para $\gamma = 1$, temos $0 < y_0 < 1$, isto é, as CCAPC ocorrem em qualquer posição do intervalo $[0, 1]$ confinador das partículas quando elas têm massas iguais. No entanto, isto não acontece para $\gamma \neq 1$: para $\gamma > 1$, à medida que se aumenta γ , a posição mínima de (4.30) aproxima-se de 1. Como $y_0 \in [0, 1]$, o intervalo de valores de y_0 que favorece a realização de CCAPC fica cada vez menor neste limite. Para $\gamma < 1$, a situação é semelhante, pois a redução de γ para valores cada vez próximos de 0, leva a extremidade superior se aproximar de 0, em que $y_0 \in [0, 1]$. Portanto, o aumento da diferença entre as massas das partículas leva a uma restrição maior sobre a posição inicial y_0 para a realização de CCAPC;

2. $\eta \neq 0$, $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} \neq 0$; logo, as extremidades do intervalo para que ocorra as

CCAPC são deslocadas em relação à situação descrita no item acima: re-escrevendo $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} = \eta v_2^{(a)}$ como $v_1^{(a)} + \gamma' v_2^{(a)} = 0$, em que $\gamma' = \gamma - \eta$, segue-se que

$$\frac{\gamma' - 1}{\gamma' + 1} < y_0 < \frac{2\gamma'}{\gamma' + 1}. \quad (4.31)$$

Se $\eta > 0$, então $\gamma' < \gamma$ e, pelo item 1 acima, a extremidade superior de (4.31) situa-se à esquerda da extremidade superior de (4.30); se $\eta < 0$, então $\gamma' > \gamma$ e, por conseguinte, a extremidade inferior de (4.31) situa-se à direita da extremidade inferior de (4.30).

As restrições $0 < y_{2k} < 1$ e $0 < y_{2k+1} < 1$ às Eqs. (4.24) fornecem a condição sobre a posição inicial y_0 para que ocorram CCAPC,

$$-2k\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < y_0 < 1 - 2k\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}),$$

$$\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 2k\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < y_0 < \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 2k\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}).$$

Isolando o inteiro $2k$, podemos estimar o número de CCAPC para:

- $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$

$$-\frac{y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} < 2k < \frac{1 - y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})}, \quad (4.32)$$

$$\frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) < 2k < \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right). \quad (4.33)$$

Estimamos o número de colisões AP completas como sendo o inteiro par $2k = 2k_m$ mais próximo do menor valor das extremidades superiores de (4.32) e (4.33) (representado por $\min\{a, b\}$),

$$2k_m = \left\lfloor \min \left\{ \frac{1 - y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})}, \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) \right\} \right\rfloor, \quad (4.34)$$

ou seja,

$$2k_m = \left\lfloor \frac{1 - y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \right\rfloor, \quad (4.35)$$

para $v_2^{(a)} < |v_1^{(a)}|$ e $\gamma > 1$, ou

$$2k_m = \left\lfloor \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) \right\rfloor, \quad (4.36)$$

para $v_2^{(a)} > |v_1^{(a)}|$ e $\gamma < 1$.

Usando as Eqs. (4.24) e (4.35), a posição y_{2k_m} é a última posição de colisão AP completa par, pois $y_{2k_m} \lesssim 1$ ⁽⁴⁾ e $y_{2k_m+2} > 1$; consequentemente, a posição $y_{2k_m+1} \gtrsim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)}-v_2^{(a)}} - 1$ é a última posição de colisão das CCAPC. Já para as Eqs. (4.24) e (4.36), temos $y_{2k_m} \lesssim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)}-v_2^{(a)}} < 1$ e $y_{2k_m+1} \gtrsim 0$. Isto mostra que y_{2k_m} não é a última posição de colisão AP completa par, pois $0 < y_{2k_m+2} < 1$; y_{2k_m+1} é a última posição de colisão AP completa ímpar, pois $y_{2k_m+3} < 0$. Logo, y_{2k_m+2} é a última posição de colisão das CCAPC.

$$\bullet \mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < 0$$

$$\frac{1 - y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} < 2k < -\frac{y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})}, \quad (4.37)$$

$$\frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) < 2k < \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right), \quad (4.38)$$

e, com procedimento análogo ao caso $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$, obtemos,

$$2k_m = \left\lfloor \min \left\{ -\frac{y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})}, \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) \right\} \right\rfloor, \quad (4.39)$$

ou seja,

$$2k_m = \left\lfloor -\frac{y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \right\rfloor, \quad (4.40)$$

para $|v_1^{(a)}| < v_2^{(a)}$ e $\gamma < 1$, ou

$$2k_m = \left\lfloor \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) \right\rfloor, \quad (4.41)$$

para $|v_1^{(a)}| > v_2^{(a)}$ e $\gamma > 1$.

Ocorrendo o resultado dado pela Eq. (4.40), temos $y_{2k_m} \gtrsim 0$ como a última posição de colisão AP completa par e $y_{2k_m+1} \lesssim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)}-v_2^{(a)}}$ a última posição de colisão AP completa, que é um resultado similar àquele obtido da Eq. (4.35). Para a Eq. (4.41), também temos um resultado similar ao da Eq. (4.36), em que a última posição de colisão AP completa é y_{2k_m+2} , e não $y_{2k_m} \gtrsim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)}-v_2^{(a)}} - 1$. A posição $y_{2k_m+1} \lesssim 1$ é a última posição de colisão AP completa ímpar.

Portanto, o inteiro $2k = 2k_m$ dada pelas Eqs. (4.35), (4.36), (4.40) e (4.41) corresponde a última colisão AP completa par na qual y_{2k} e y_{2k+1} sejam posições de colisão AP

⁴ $a \lesssim b$ denota que $a < b$ e $a \approx b$.

completa. Serão as últimas posições de colisão AP completa quando $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$, a **1** for mais rápida que a **2** e $\gamma > 1$, ou quando $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < 0$, a **2** for mais rápida que a **1** e $\gamma < 1$; caso contrário, y_{2k+2} será a última posição de colisão AP completa quando $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$, a **1** for mais lenta que a **2** e $\gamma < 1$, quando $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < 0$, a **2** for mais lenta que a **1** e $\gamma > 1$.

A colisão subsequente à última colisão AP completa pode ser, a princípio, P ou AP incompleta. Essa colisão não pode ser AP incompleta após as CCAPC. Para vermos isto, derivemos antes a condição para que ocorra colisão AP incompleta. Considere $\gamma > 1$, $(v_{1a}, v_{2a}) = (-v_1^{(a)}, -v_2^{(a)})$ e $(v_{1d}, v_{2d}) = (v_1^{(d)}, v_2^{(d)})$, conforme as linhas L3 e L4 da Tabela 4.3. Embora esteja implícito nesta tabela que $v_1^{(d)} < 0$ e $v_2^{(d)} > 0$, desconsideramos, por ora, esta condição para o propósito aqui. Pela Eq. (3.5), obtemos facilmente que $v_1^{(d)} < 0$; então, para que a próxima colisão p-p seja AP incompleta, a velocidade $v_2^{(d)} < 0$, da qual decorre que $\frac{-v_1^{(a)}}{v_2^{(a)}} < \frac{\gamma-1}{2}$. Mas esta condição não condiz com àquela de ocorrência de CCAPC, $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} \approx 0$. Isto significa que a imposição da condição $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} \approx 0$ exclui a possibilidade da colisão ser AP incompleta, pois, como já sabemos, geram-se apenas dois estados pós-colisão p-p, com configurações de movimento sempre antiparalelas. Assim, a colisão subsequente só pode ser P.

As Eqs. (4.35), (4.36), (4.40) e (4.41) mostram também que $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$ aproximando-se de zero, aumenta-se o valor do inteiro $2k$. Como $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$ é proporcional à velocidade do centro de massa, isto significa que o número de colisões AP completas cresce com a diminuição da velocidade do centro de massa e, para o caso do centro de massa em repouso, há apenas colisões AP completas (como já verificamos nas possibilidades **P1** e **P2**). Além disso, as Eqs. (4.34) e (4.39) são regras gerais para se prever o número possível de CCAPC, bastando conhecer as velocidades iniciais e a posição inicial em cada nova sequência de colisões AP completas.

Apresentamos, a seguir, dois exemplos particulares para $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$ juntamente com resultados numéricos para ilustrar a nossa análise até aqui. Não apresentamos exemplos para $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < 0$ por apresentar resultados semelhantes.

Exemplo 6: Sejam a razão das massas $\gamma = 4$, as velocidades iniciais, $v_1^{(a)} = -4$, $v_2^{(a)} = 1,0001$ e a posição de colisão inicial $y_0 = 0,6653$.

O valor da posição inicial arbitrada condiz com o intervalo dado por (4.29), $0,599968 < y_0 < 1,599968$, ou seja, $0,599968 < y_0 < 1$, pois $y_0 \in [0, 1]$. Então, essas condições iniciais conduzem às CCAPC. A velocidade do centro de massa é positiva, então $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$. Substituindo os valores acima, encontramos $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) = 3,199936 \times 10^{-5}$ e, por isso, deve haver um número grande de CCAPC. Então, pelas Eqs. (4.32)-(4.33), temos

$-2041,66 < 2k < 29208,96$ e $-20791,04 < 2k < 10459,58$. Logo, pela Eq. (4.34), $2k = 10458$. Então, pelas Eqs. (4.24), as posições de colisão são: $y_{10458} = 0,999949307$, $y_{10459} = 0,600018694$ e $y_{10460} = 1,000013306$; assim, y_{10458} é a última posição de colisão par em CCAPC, pois $y_{10460} > 1$. A última posição de colisão das CCAPC é em y_{10459} , conforme mostra o gráfico da Fig. 4.15(b)-(c).

Os resultados numéricos das Figs. 4.14-4.15 corroboram os resultados do exemplo 6. As Figs. 4.14(a)-(c) mostram que até $I - 1 = 10459$, as posições de colisão seguem as Eqs. (4.24) com $y_0 = 0,6653$. Nas colisões posteriores, observamos que há vários segmentos de retas seguindo as Eqs. (4.24), mas com valores diferentes de y_0 , indicando a presença de várias CCAPC mais curtas que a inicial, intercaladas por colisões P e AP incompletas. A Fig. 4.15 mostra também que as CCAPC não desaparecem após as primeiras colisões P e AP incompletas. Como as CCAPC são propiciadas por valores muito pequenos de velocidade do centro de massa, então as colisões P e AP incompletas elevam a velocidade do centro de massa nas CCAPC que venham a surgir, como mostra a Fig 4.16. Além disso, como a **1** é mais rápida que a **2** e $\gamma > 1$, vale a Eq. (4.35), a qual nos diz que o número de CCAPC depende apenas de $1 - y_0$; no entanto, como y_0 deve respeitar a condição (4.29), segue-se que o número de CCAPC diminui à medida que y_0 aumenta de $\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}$ até $L = 1$. Enfim, para que ocorra mais uma vez CCAPC longa, o centro de massa das partículas deve ser tão pequeno quanto a da condição inicial e partir de uma posição y_0 mais próxima possível da extremidade inferior de (4.29). O próximo exemplo ilustra o que acontece quando consideramos a **1** mais massiva e mais lenta que a **2**. Não detalharemos os resultados que forem semelhantes a do exemplo 6.

Exemplo 7: Sejam a razão das massas $\gamma = \frac{1}{4}$, as velocidades iniciais, $v_1^{(a)} = -1$, $v_2^{(a)} = 4,0004$.

A condição (4.29) fornece o seguinte intervalo de validade da posição inicial: $-0,600032 < y_0 < 0,399968$. Evidentemente, como $y_0 \in [0, 1]$, temos $0 < y_0 < 0,399968$. Arbitramos, então, o valor $y_0 = 0,1973$. A velocidade do centro de massa das condições iniciais é positiva, então as posições de colisão pares é uma função linear crescente e as ímpares, um função linear decrescente, como mostra a Fig. 4.17(a). As Figs. 4.17(b)-(c) mostram pleno acordo entre os resultados numéricos e os teóricos até que cesse as CCAPC. Ao contrário da Fig. 4.14(a), na Fig. 4.17(a) a intersecção das retas subjacentes das posições de colisão pares e ímpares não é evidente, pois o ponto de intersecção é bem próximo de $y_0 = 0,1973$. Para se confirmar este resultado, basta igualar as Eqs. (4.24), dando $y_{2k_0} = \frac{v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}$ (a metade do valor da extremidade superior da condição (4.29)), e substituindo os valores das velocidades iniciais, obtemos $y_{2k_0} = 0,199998$. Pela Eq. (4.24), podemos estimar

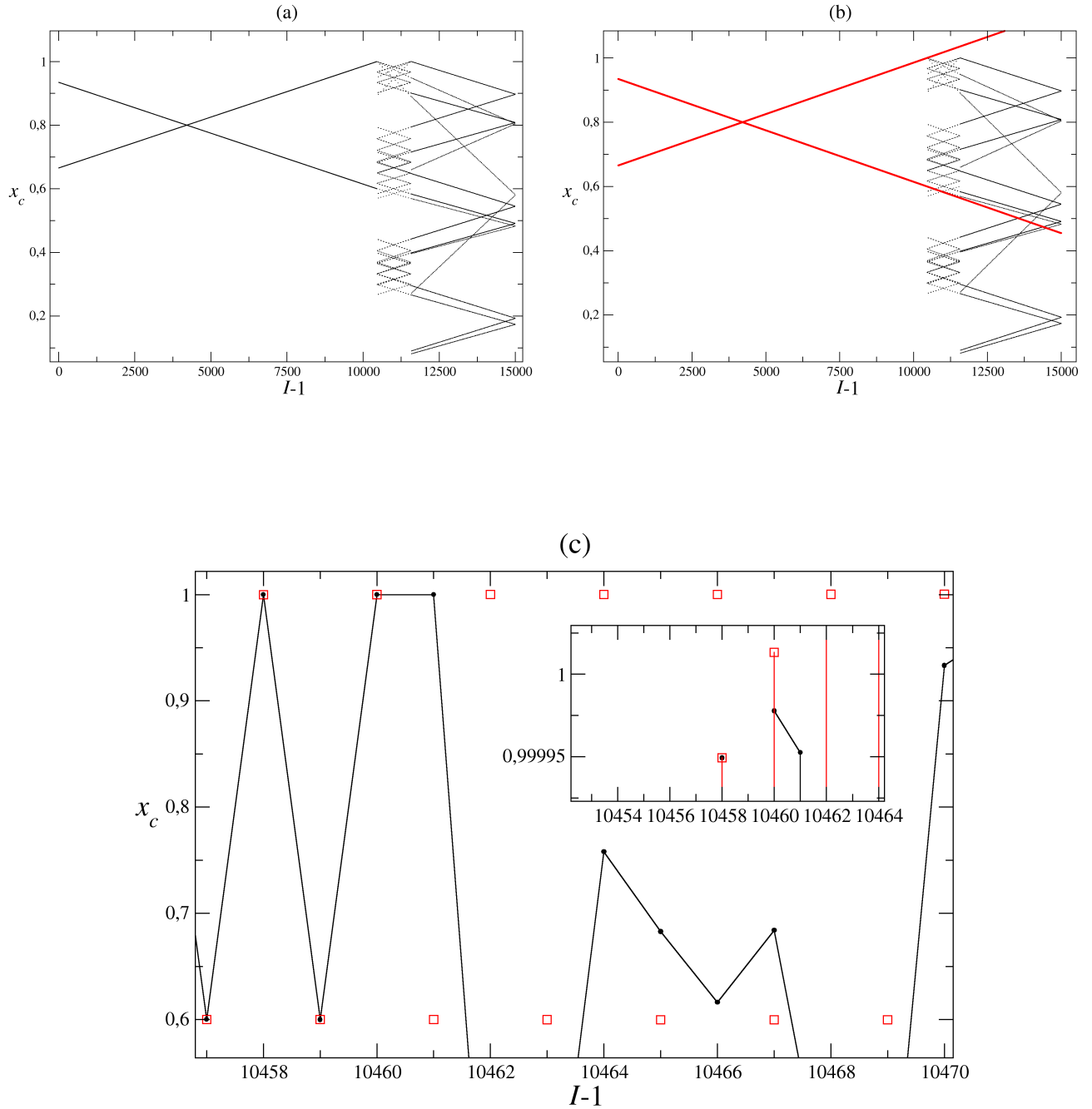


Figura 4.14: Posição de colisão em função do número de colisões $I - 1$ (é $I - 1$, ao invés de I , porque numericamente a posição y_0 corresponde a I): (a) Enquanto ocorrer CCAPC, as posições de colisão pares e ímpares mudam linearmente até $I - 1 = 10459$. (b) Conformidade dos resultados numéricos com os teóricos (em vermelho). (c) Ampliação da região onde se viola pela primeira vez as Eqs. (4.24) e mostrar o acordo entre os valores numéricos e teóricos. Em particular, a posição em $I - 1 = 10460$ numérica e teórica não coincidem realmente, como exibido no gráfico interno, pois $y_{10460} = 1,000013306$, enquanto o valor numérico correspondente é $x_c = 0,999977824$.

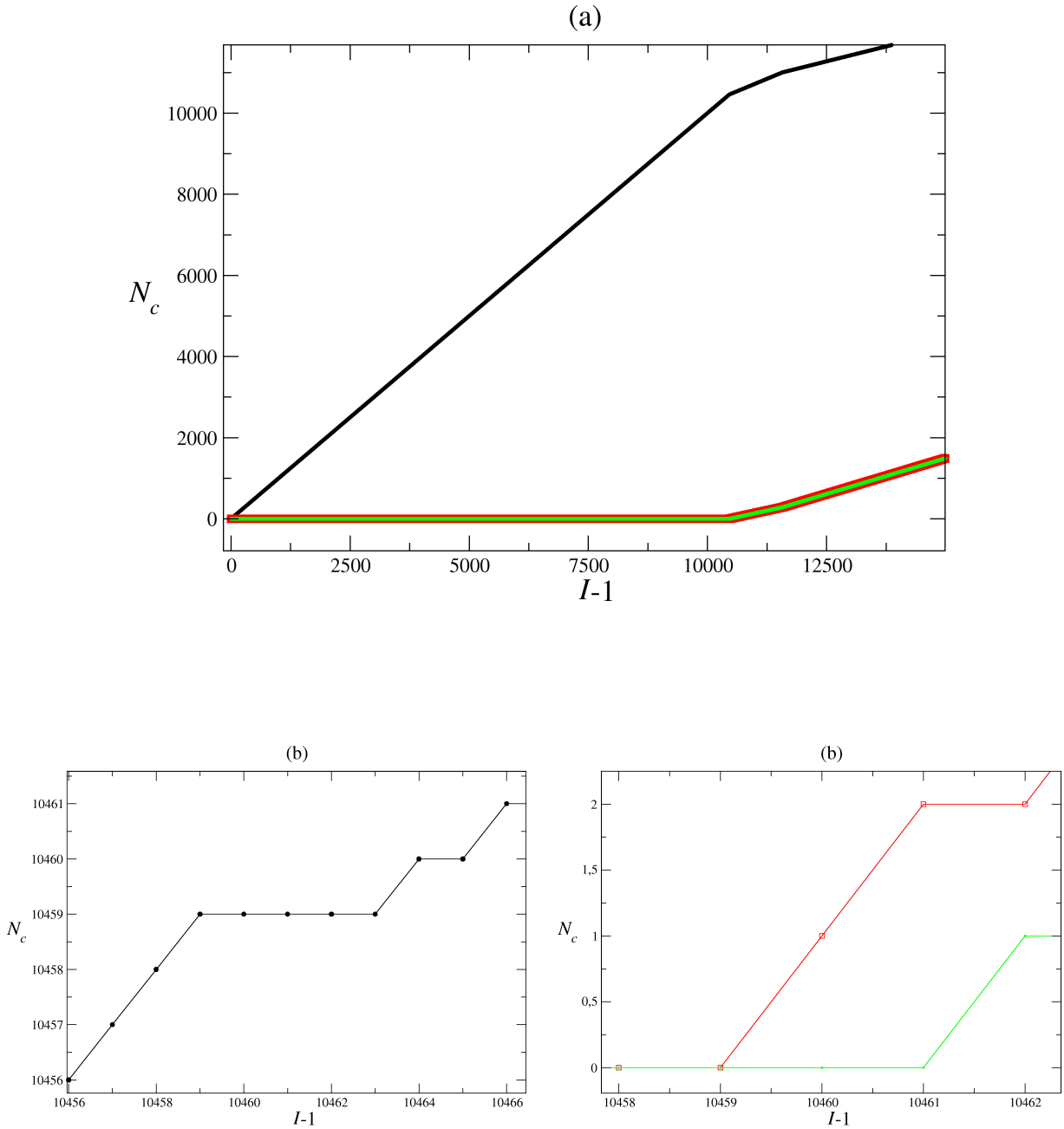


Figura 4.15: Número de colisões $N_c := N_c(I - 1)$ AP completas (linha preta), P (linha vermelha) e AP incompletas (linha verde): (a) e (b) CCAPC exclusivas até $I - 1 = 10459$. (c) Em $I - 1 = 10460$ ocorre a primeira colisão P.

$2k_0$. No caso do exemplo 6, a posição de intersecção é $y_{2k_0} = 0,799984$. Evidentemente, se tivéssemos escolhido, digamos, $y_0 = 0,20$, não observaríamos nenhuma intersecção na Fig. 4.17(a)-(b). Além da velocidade do centro de massa ser positiva, a partícula **1** é mais lenta que a **2** e $\gamma < 1$. Então, o número de CCAPC é dada pela Eq. (4.36), dando $2k = [6333,88]$, ou seja, $2k = 6332$, com $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) = 3,19974402 \times 10^{-5}$. Com

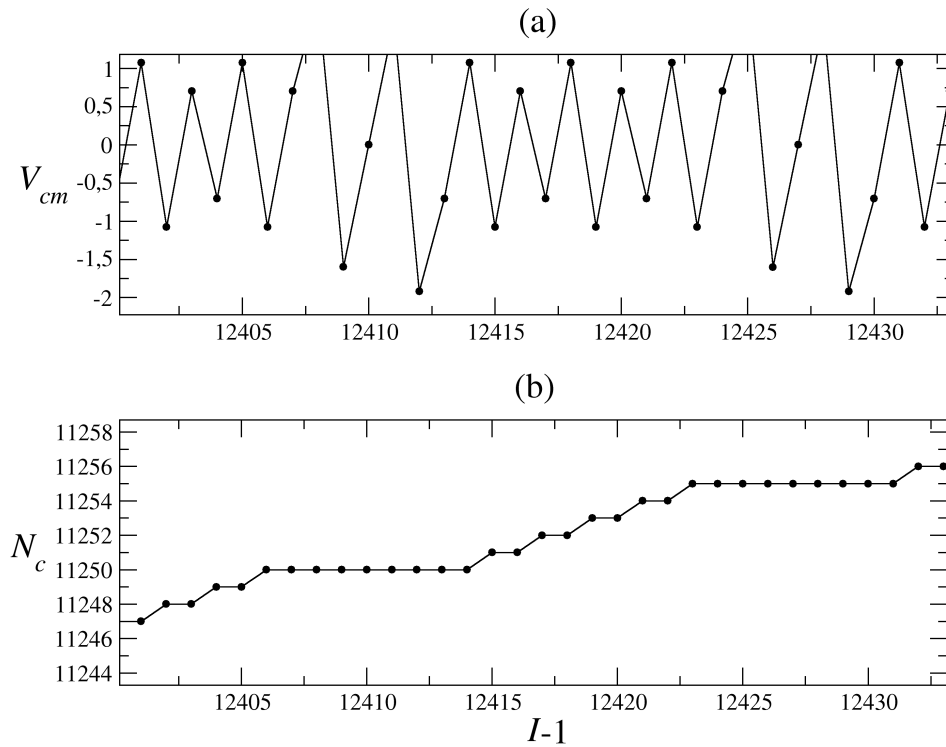


Figura 4.16: (a) Velocidade do centro de massa das partículas imediatamente depois de uma colisão p-p. (b) Número de colisões AP completas. Observe para alguns valores de $I - 1$ que ocorre uma colisão AP completa, a velocidade do centro de massa é maior que a das velocidades iniciais, $V_{cm}^{(a)} = 8 \times 10^{-5}$.

isto, determinamos teoricamente as últimas posições das CCAPC: $y_{6332} = 0,399907791$, $y_{6333} = 6,0211183 \times 10^{-5}$, $y_{6334} = 0,399971786$ e $y_{6335} = -3,783697 \times 10^{-6}$, ou seja, y_{2k+2} é a última posição de colisão AP completa e $y_{2k+3} < 0$. Os gráficos da Fig. 4.18 mostram a exclusividade de colisões AP completas até a colisão $I - 1 = 6334$ e, em $I - 1 = 6335$, ocorre a primeira colisão P. Portanto, temos plena concordância entre a previsão teórica e os resultados numéricos.

Os resultados gerais para as CCAPC mostraram que, se a velocidade do centro de massa fosse nula, ao menos imediatamente antes das colisões p-p, gerar-se-ia um número finito de estados (possibilidades **P1** e **P2**) e a CCAPC é uma sequência de colisões infinita e periódica. Para se gerar mais estados, como vimos nas seções anteriores, deve ocorrer colisões P e AP incompletas. Isto é conseguido se a velocidade inicial do centro de massa das partículas imediatamente depois de uma colisão p-p for não nula, pois o número de CCAPC torna-se finito, gerando-se, em algum momento, uma colisão P, a qual pode ser seguida ou não por uma colisão AP incompleta. No entanto, mesmo com a presença de colisões P e AP incompletas, há muitas sequências de CCAPC entre essas colisões,

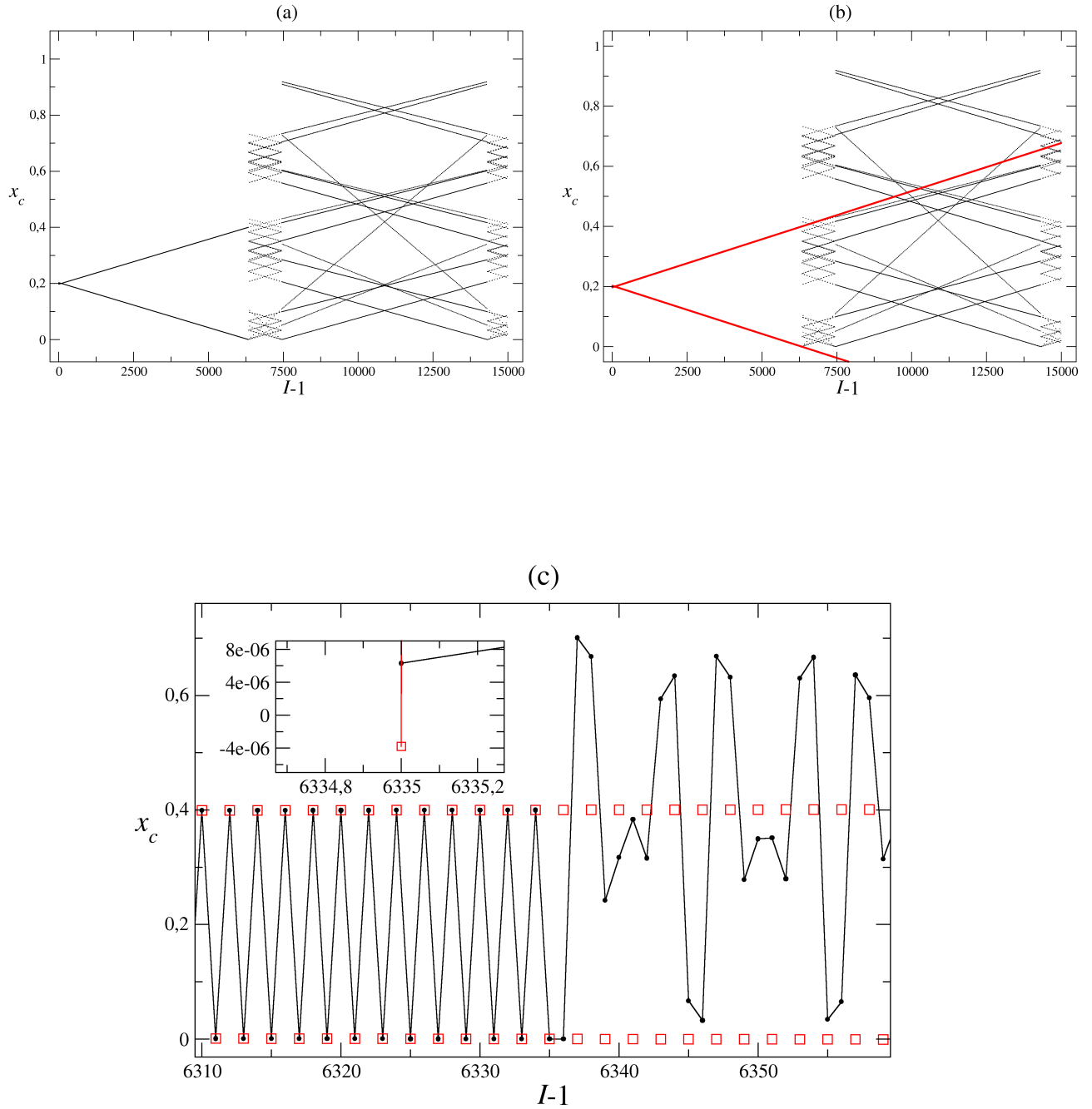


Figura 4.17: Posição de colisão em função do número de colisões $I - 1$: (a) Enquanto ocorrer CCAPC, as posições de colisão pares e ímpares mudam linearmente até $I - 1 = 6334$. (b) Conformidade dos resultados numéricos com os teóricos (em vermelho). (c) Ampliação da região onde se viola pela primeira vez as Eqs. (4.24) e mostrar o acordo entre os valores numéricos e teóricos. Em particular, a posição em $I - 1 = 6335$ numérica e teórica não coincidem realmente, como exibido no gráfico interno, pois $y_{6335} = -3,783697 \times 10^{-6}$, enquanto o valor numérico correspondente é $x_c = 6,305826 \times 10^{-6}$.

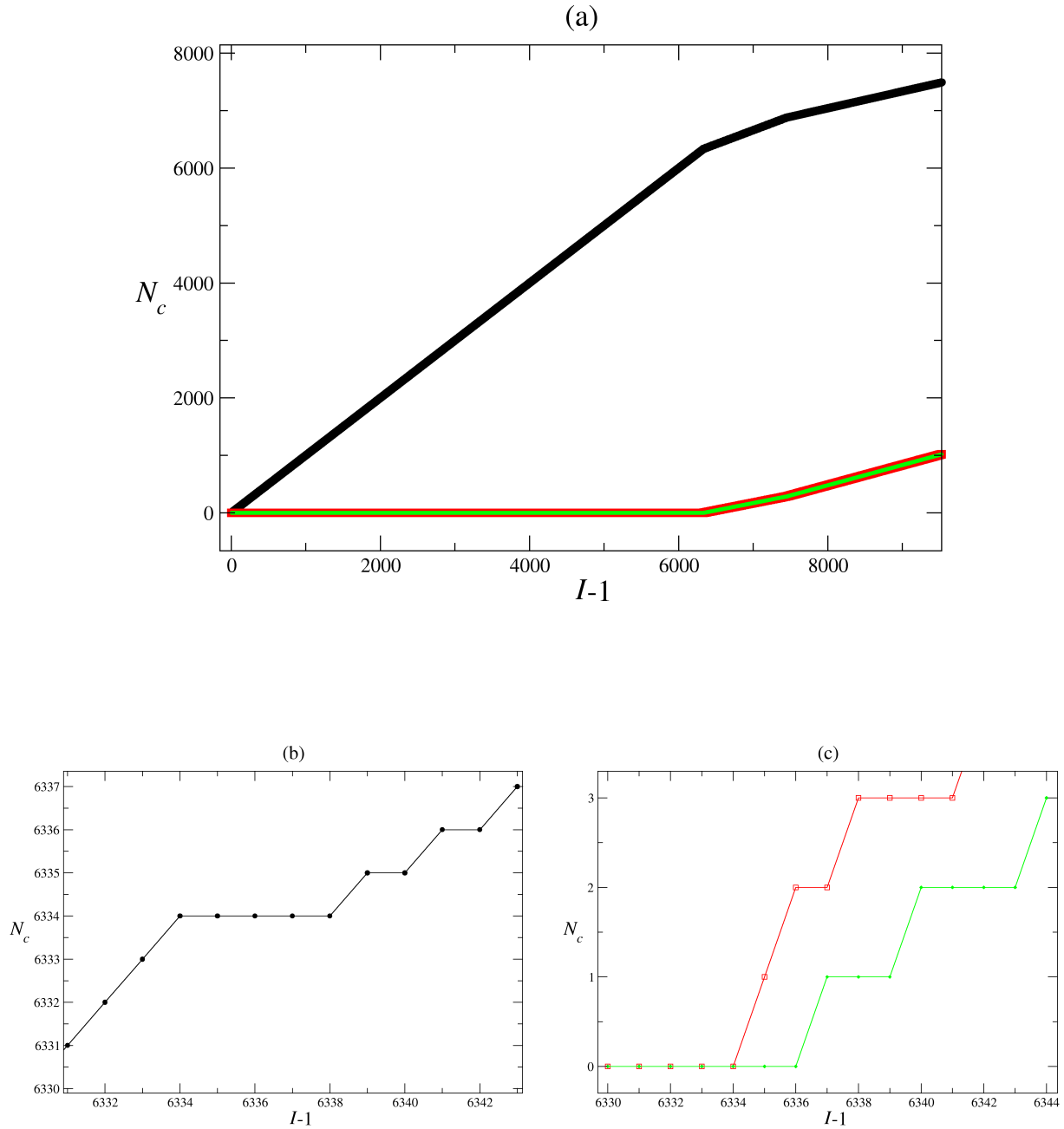


Figura 4.18: Número de colisões $N_c(I-1)$ AP completas (linha preta), P (linha vermelha) e AP incompletas (linha verde): (a) e (b) CCAPC exclusivas até $I-1 = 6334$. (c) Em $I-1 = 6335$ ocorre a primeira colisão P.

mantendo lenta a proliferação de novos estados. Esta é a quebra de ergodicidade por CCAPC. Ademais, se a razão das massas for superior a 3 (ou inferior a $\frac{1}{3}$), não apenas temos colisões P e AP incompletas, como também CCP e CCAPI intercaladas nas várias sequências de CCAPC. Afastando-se a razão das massas da unidade, o número de colisões nas CCP e nas CCAPI aumentam e, nas CCAPC, diminuem, mas não as eliminam. É

esta a situação que veremos na próxima seção.

4.5 Quebra de Ergodicidade para CCAPI e CCP

Como vimos na seção 4.3, CCAPI geram CCP. Os estados possíveis em um ciclo de CCAPI-CCP são distintos entre si e são dados por

$$z_{2k-1} = (-1)^{k+1} e^{ik\theta} \overline{z_0}, \quad z_{2k} = (-1)^k e^{-ik\theta} z_0, \quad (4.42)$$

em que $z_0 = \alpha - i\beta$ e $\gamma \in (3, \infty)$ (o caso $\gamma \in (0, 1/3)$ é análogo), $k \in [1, N-1]$ para N CCAPI e $k \in [N, 2N-1]$ para N CCP. A Fig. (4.19) ilustra esta situação juntamente com as respectivas posições de colisão. Se ocorrer todas a N colisões consecutivas, completa-se o ciclo de CCAPI-CCP. Para que se possa gerar infinitos estados, além de $\frac{\theta}{\pi}$ ser irracional, o sistema deve iniciar outro ciclo de CCAPI-CCP, completá-la, gerar outro ciclo, e assim por diante. Dessa forma, haveria a possibilidade do sistema apresentar ergodicidade. Mostraremos na próxima subseção que não é possível o sistema gerar um número infinito de ciclos de CCAPI-CCP para se gerar infinitos estados. Nas subseções seguintes, mostramos o que acontece quando as CCP é interrompida em sua sequência de colisões por uma colisão AP completa e, caso um ciclo de CCAPI-CCP seja completado, quais são as possibilidades de colisões p-p e a sua relação com a geração de novos estados.

4.5.1 A impossibilidade de haver infinitos ciclos de CCAPI-CCP

Considere um ciclo de CCAPI-CCP, como descrito anteriormente, o qual denominamos de **C1**. Verifiquemos que não é possível ocorrer indefinidamente ciclos CCAPI-CCP.

Para a ocorrência de CCAPI, a única condição sobre a posição de colisão x_0 é que esteja no intervalo $[0, L]$, pois fisicamente a partícula **2** avança para a extremidade em 0 a cada colisão com a **1**, até se completar as N colisões AP incompletas possíveis, ou seja, $x_0 > x_0^{(1)} > \dots > x_0^{(N-1)}$. Como a próxima colisão é paralela, a primeira posição de colisão P é maior que a última posição de colisão AP incompleta, $x_0^{(N)} > x_0^{(N-1)}$. As posições de colisão nas CCP são maiores que as anteriores, $x_0^{(2N-1)} > x_0^{(2N-2)} > x_0^{(2N-3)} > \dots > x_0^{(N+1)} > x_0^{(N)}$, pois a **2** aproxima-se da extremidade em L . Para se garantir a ocorrência de N CCP, a sua primeira posição de colisão deve estar mais próxima possível da extremidade em 0 de $[0, L]$. Assim sendo, a última posição de colisão das CCP está adiante da posição inicial do ciclo **C1**, $x_0^{(2N-1)} > x_0$. Provamos isto por redução ao

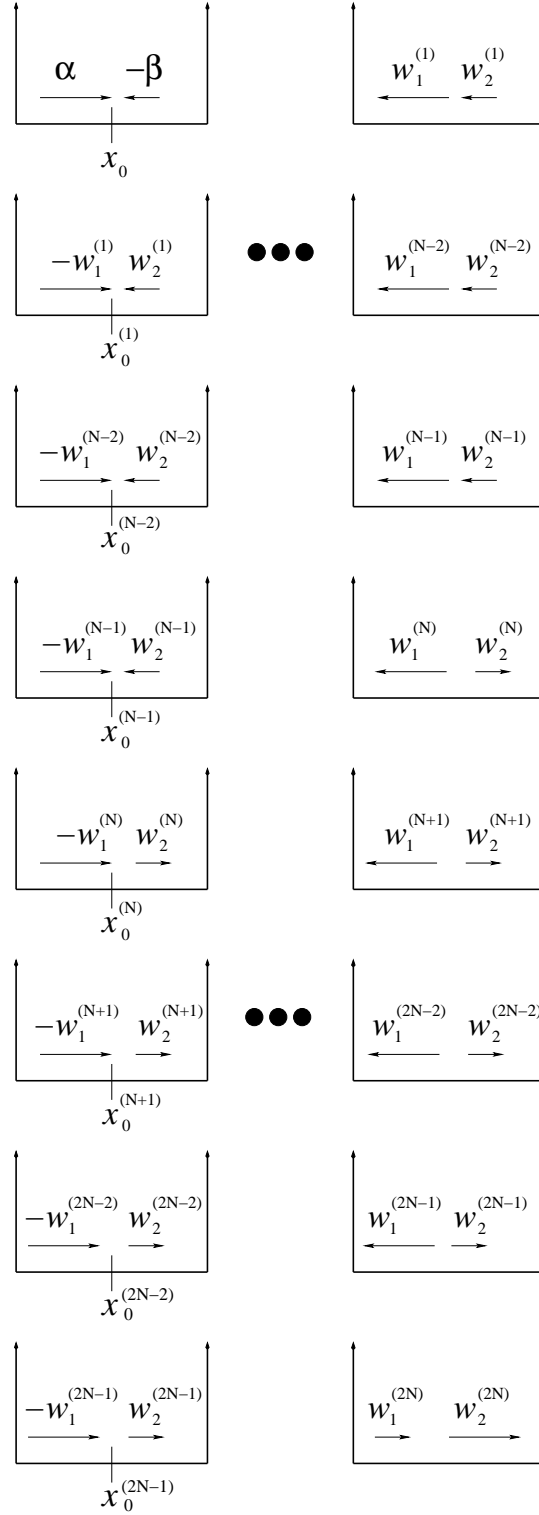


Figura 4.19: Colisões Consecutivas. As partículas partem de uma posição x_0 com um estado $z_0 = \alpha - i\beta$, iniciando-se com colisão AP incompleta até $k = N - 1$. A partir de $k = N$, ocorrem colisões P até $k = 2N - 1$.

absurdo, ou seja, assumimos que $x_0^{(2N-1)} \leq x_0$ e, através da Eq. (4.17) para $k = 2N - 1$,

$$x_0^{(2N-1)} = -\frac{\alpha \sin \frac{\theta}{2} + \beta \cos \frac{\theta}{2}}{\alpha \sin \frac{(4N-1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(4N-1)\theta}{2}} x_0, \quad (4.43)$$

e as velocidades do centro de massa W_{cm} e relativa w_r normalizadas para $w_1^{(N)} < 0$ e $w_2^{(N)} > 0$,

$$W_{cm} = w_1^{(N)} \cos \frac{\theta}{2} + w_2^{(N)} \sin \frac{\theta}{2} > 0, \quad (4.44a)$$

$$w_r = w_1^{(N)} \sin \frac{\theta}{2} + w_2^{(N)} \cos \frac{\theta}{2} < 0, \quad (4.44b)$$

identificamos uma contradição. De fato, sendo $x_0^{(2N-1)} \leq x_0$, pela Eq. (4.43), obtemos

$$(\alpha \sin N\theta + \beta \cos N\theta) \cos \left[(2N-1) \frac{\theta}{2} \right] \leq 0. \quad (4.45)$$

Expressando as Eqs. 4.44 em termos de α e β ,

$$(-1)^{N+1} \left\{ \alpha \cos \left[(2N-1) \frac{\theta}{2} \right] - \beta \sin \left[(2N-1) \frac{\theta}{2} \right] \right\} > 0, \quad (4.46a)$$

$$-(-1)^{N+1} \left\{ \alpha \sin \left[(2N-1) \frac{\theta}{2} \right] - \beta \cos \left[(2N-1) \frac{\theta}{2} \right] \right\} < 0, \quad (4.46b)$$

encontramos dois casos possíveis: N par e N ímpar. Para N par, $w_2^{(N)} > 0$ implica que $(\alpha \sin N\theta + \beta \cos N\theta) < 0$; então, a fim de satisfazer a Eq. (4.45), $\cos \left[(2N-1) \frac{\theta}{2} \right] \geq 0$. Mas, pelas Eqs. 4.46, $\cos \left[(2N-1) \frac{\theta}{2} \right] < 0$, contradição! A prova para o caso N ímpar é análoga.

Sabemos agora que a última posição de colisão do ciclo **C1** é posterior a posição inicial x_0 . Temos, então, duas possibilidades: a primeira é $x_0^{(2N-1)} > L$ (violação da condição de posição), ou seja, a última colisão CCP não acontece e, portanto, não temos N colisões P. Esta última colisão, ao invés, será AP completa. O mesmo vale se qualquer uma das outras posições de colisão CCP superar L . Isto pode acontecer porque, além de estar mais perto de L , a partícula **2** fica mais rápida que a **1** em cada colisão p-p, de maneira a aumentar as chances de a **2** colidir com a parede em L antes que a **1** a alcance. Esses casos serão tratados posteriormente. A segunda possibilidade é $x_0^{(2N-1)} < L$. Neste caso, temos um novo ciclo **C2** em uma nova posição de colisão inicial $x'_0 = x_0^{(2N-1)} > x_0$. Isto significa que a **2** estará cada vez mais perto da extremidade L do intervalo em cada colisão p-p com a **1**, e lembrando que a **2** fica mais rápida em cada uma das CCP, propicia-se à **2** em chegar até a parede antes que a **1** colida com ela. Ou seja, em cada ciclo que acontecer, a situação assemelha-se à primeira possibilidade, de forma que, em algum ciclo **Cq**, a posição de colisão vai superar L e uma colisão AP completa acontecerá. Isto tudo vai limitar o número de estados gerados, comprometendo a ergodicidade do sistema.

4.5.2 CCP interrompidas por uma colisão AP completa

Na seção anterior vimos que em cada colisão P, a **2** aproxima-se da parede em L . Isto favorece a situação de a **2** colidir com a parede antes da colisão p-p entre **1** e **2**, ou seja, a CCP é interrompida por uma colisão AP completa. Vejamos o que acontece com o conjunto de estados neste caso.

Em princípio, a ocorrência de todas as colisões de um ciclo de CCAPI-CCP geraria o seguinte conjunto de estados

$$\mathbb{E} = \{z_0, z_{2l-1}, z_{2l}\}_{1 \leq l \leq N-1} \cup \{z_{2l-1}, z_{2l}\}_{N \leq l \leq 2N-1}.$$

Considere agora o seguinte ciclo **C** de CCAPI-CCP: geram-se todos os estados possíveis de CCAPI mas, na r -ésima colisão p-p, viola-se a condição de posição de CCP (acompanhe o fluxograma da Fig. 4.20). Logo, z_{2r-1} é o último estado gerado neste ciclo e o conjunto de estados é

$$\mathbb{E}_1 = \{z_0, z_{2l-1}, z_{2l}\}_{1 \leq l \leq N-1} \cup \{z_{2N-1}, z_{2N}, \dots, z_{2r-1}\}.$$

Ambas as partículas colidem cada uma com as paredes, gerando-se o estado $\mathfrak{z}_{2r} = -z_{2r-1}$, ao invés do estado z_{2r} ; segue-se, enfim, uma segunda colisão AP completa, originando o estado $\mathfrak{z}_{2r+1} = e^{i\theta} \overline{\mathfrak{z}_{2r}} = -z_{2r-2}$. O estado \mathfrak{z}_{2r+1} corresponde às velocidades negativas das partículas, de maneira que a **1** seja mais rápida que a **2**. Assim, a **1** colide com a parede em 0, dando $\mathfrak{z}_{2r+2} = -\overline{\mathfrak{z}_{2r+1}} = -z_{2r-3}$.

Temos agora as condições para um novo ciclo **C'** de CCAPI-CCP. Sendo $z'_0 = \mathfrak{z}_{2r+2}$ o novo estado inicial, os estados deste ciclo são, por (4.42),

$$z'_{2l'-1} = -z_{2r-2l'-2}, \quad z'_{2l'} = -z_{2r-2l'-3}. \quad (4.47)$$

Perceba que os índices das Eqs. (4.47) retrocedem à medida que se aumenta l' , indicando que os estados gerados são os negativos dos estados anteriores das CCP. Mais detalhadamente, os estados das CCAPI são os negativos dos estados gerados pelas CCP do ciclo **C** e das CCP, os negativos dos estados gerados pelas CCAPI do ciclo **C**. Assim sendo, $2r - 2l' - 2 \geq 0$, dando $l' \leq r - 1$.

Nas CCP do ciclo **C'**, duas coisas podem acontecer:

1. viola-se a condição de posição; conseqüentemente, interrompe-se as CCP com uma colisão AP completa. Então, sendo $z_{2r'-1}$ o último estado de CCP, o conjunto de

estados é

$$\mathbb{E}_2 = \{z'_0, z'_{2l'-1}, z'_{2l'}\}_{1 \leq l' \leq N-1} \cup \{z'_{2N-1}, z'_{2N}, \dots, z'_{2r'-1}\},$$

no qual incluímos, neste conjunto, os estados gerados na transição do ciclo **C** para **C'**, de maneira que $z'_{2r'} = -z'_{2l'-1} = z_{2r-2r'-2}$ é um dos estados do conjunto \mathbb{E}_1 , pois $r' \leq r-1$, com a partícula **1** mais rápida que a **2**. Note que quanto mais próximo r' estiver de $N-1$, após a segunda colisão AP completa, retorna-se cada vez mais para o início da lista de estados do conjunto \mathbb{E}_1 (atinge-se o início no caso 2a abaixo). Então, o sistema gera novamente os estados anteriores, quebrando a ergodicidade. Este processo cessará quando não houver mais interrupção de CCP (caso 2b abaixo, por exemplo.)

2. as CCP progridem até se gerar o estado $-z_0 = -\alpha + \imath\beta$. No item anterior, a **1** é mais rápida que a **2**, mesmo a **1** perdendo energia cinética para a **2** em cada colisão p-p. Aqui, por ser o último estado das CCP, $-z_0$ corresponde à situação na qual a **1** é mais lenta que a **2**. Então, há duas outras possibilidades:

- (a) caso particular do item 1: ambas as partículas colidem com as paredes, ocorrendo, portanto, uma colisão AP completa e gerando-se o estado z_0 , e retorna-se ao ponto inicial do processo descrito anteriormente;
- (b) a **2** colide com a parede,

$$Z_0 = -\overline{z_0},$$

e colide com a **1**,

$$Z_1 = e^{\imath\theta}\overline{Z_0} = -e^{\imath\theta}z_0,$$

gerando um estado diferente daqueles dos conjuntos \mathbb{E}_1 e \mathbb{E}_2 . Neste caso, as partículas sairão com velocidades negativas, a **1** colidirá com a parede,

$$Z_2 = -\overline{Z_1} = e^{-\imath\theta}\overline{z_0} \equiv Z'_0,$$

que é o novo estado inicial para o novo ciclo de CCAPI-CCP. Os estados possíveis são

$$Z'_{2k-1} = (-1)^{k+1}e^{\imath(k+1)\theta}z_0, \quad Z'_{2k} = (-1)^k e^{-\imath(k+1)\theta}\overline{z_0}. \quad (4.48)$$

Mas, definindo $k' = -k - 1$, as Eqs. (4.48) ficam

$$Z'_{-2k'-3} = (-1)^{k'}e^{-\imath k'\theta}z_0, \quad Z'_{-2k'-2} = (-1)^{k'+1}e^{\imath k'\theta}\overline{z_0},$$

que são as Eqs. (4.42) se $k \leq 0$. Isto significa que o conjunto de estados possíveis da Eq. (4.48) é o conjunto dos negativos dos estados que gerariam z_0 em uma reversão temporal na dinâmica. Então os estados da Eq. (4.48) são diferentes daquele do conjunto inicial \mathbb{E} , e caso ocorra alguma colisão AP completa, geram-se estados que culminarão novamente na condição inicial z_0 .

Assim, de qualquer forma, recaímos no ciclo de CCAPI-CCP inicial. Perceba que a interrupção das CCP por colisões AP completas é maior que àquela para se gerar todos os estados possíveis de um ciclo. Isto tem a ver com a condição muito restritiva sobre a posição de colisão inicial para ocorrer as N CCP (a posição inicial deve estar muito próxima da extremidade em 0 do intervalo). O sistema visita recorrentemente os mesmos estados, na busca de uma posição inicial de colisão que permita sair do ciclo de CCAPI-CCP para gerar um outro ciclo que não conduza o sistema novamente para o ciclo original de colisões consecutivas. Na Fig. 4.20, destacamos por linhas descontínuas como aquelas que levam diretamente para o ciclo de CCAPI-CCP inicial e por linha contínua, a transição para um novo ciclo de estados, apesar da alta possibilidade de conduzir o sistema para o estado inicial.

Exemplo 8: Suponha o caso particular no qual são possíveis 4 CCAPI e 4 CCP. As CCP são interrompidas na 3ª colisão p-p.

O conjunto de estados possíveis são

$$\mathbb{E} = \{z_0, z_1, z_2, z_3, z_4, z_5, z_6, z_7\}.$$

Como a interrupção acontece na 3ª colisão p-p, z_5 é o último estado gerado na colisão P. Os estados possíveis gerados em seguida são $-z_5$, $-z_4$, $-z_3$, $-z_2$, $-z_1$ e $-z_0$. Caso ocorresse outra colisão AP completa após a 5ª colisão p-p, o último estado dessas CCP é $-z_2$, de maneira que o estado seguinte será z_2 .

4.5.3 Ocorrência, ou de colisão AP incompleta, ou de P ou de AP completa após CCP

Vamos supor agora que o ciclo de CCAPI-CCP não seja interrompido por uma colisão AP completa, gerando todos os estados possíveis. Desse modo, o estado gerado após a última colisão P é z_{4N-3} . Este estado refere-se à situação na qual a partícula **1** é mais lenta que a **2**. Além disso, a velocidade da **1** pode ser positiva, como ilustrada na Fig. 4.19, ou negativa. De qualquer forma, esse estado é expresso, conforme as Eqs. (4.42),

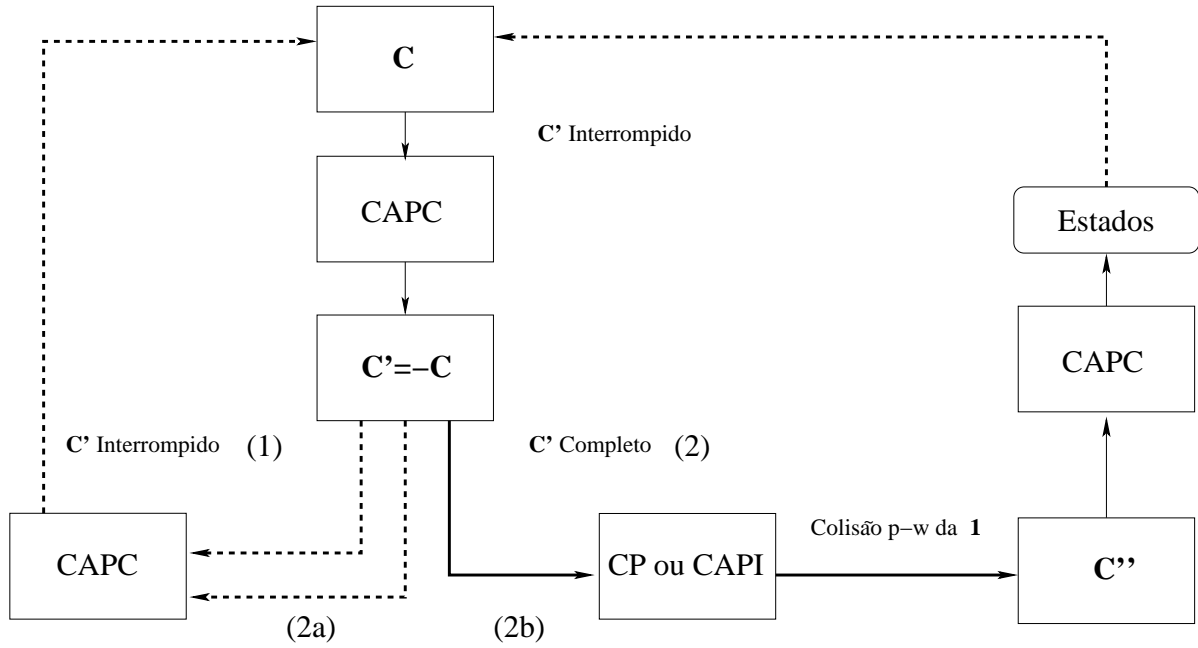


Figura 4.20: Fluxograma para CCP interrompidas por uma colisão AP completa. Para um ciclo \mathbf{C} de colisões consecutivas, a interrupção por uma colisão AP completa dessas colisões ocorrem nas CCP. Gera-se, então, um novo ciclo \mathbf{C}' dos negativos dos estados de \mathbf{C} . Interrompendo \mathbf{C}' por uma colisão AP completa, retorna-se em algum estado do ciclo \mathbf{C} , e repete-se o processo. Completando-se o ciclo \mathbf{C}' , ocorrendo colisão P ou AP incompleta, gera-se um novo ciclo \mathbf{C}'' de estados diferentes. No entanto, se ocorrer alguma colisão AP completa, gera-se um estado que conduz ao estado inicial de \mathbf{C} . A linha contínua representa a transição que favorece, em princípio, geração de novos estados, enquanto a linha descontínua, representa a situação contrária.

por

$$z_{4N-3} = e^{i(2N-1)\theta} \overline{z_0}.$$

Há três possibilidades de colisão posterior:

Colisão AP incompleta após CCP

A colisão AP incompleta acontecerá se a velocidade da **1** for positiva. Segue as etapas até se ter uma configuração que inicie um ciclo de CCAPI-CCP:

1. a **2** colide com a parede: $\overline{z_{4N-3}} = e^{-i(2N-1)\theta} z_0$;
2. colisão p-p: $e^{i(2N-1)\theta} \overline{\overline{z_{4N-3}}} = e^{i2N\theta} \overline{z_0}$;
3. colisão p-w de 1: $-\overline{(e^{i2N\theta} \overline{z_0})} = -e^{-i2N\theta} z_0 \equiv Z_0$, o estado inicial para o novo ciclo de CCAPI-CCP.

Portanto, pelas Eqs. (4.42), os estados possíveis neste novo ciclo de CCAPI-CCP são:

$$Z_{2k-1} = (-1)^k e^{i(k+2N)\theta} \overline{z_0}, \quad Z_{2k} = (-1)^{k+1} e^{-i(k+2N)\theta} z_0,$$

os quais, expressos em termos de z_{2k-1} e z_{2k} , ficam

$$Z_{2k-1} = e^{i(2N\theta+\pi)} z_{2k-1}, \quad Z_{2k} = e^{-i(2N\theta+\pi)} z_{2k}. \quad (4.49)$$

As Eqs. (4.49) mostram que se $\frac{\theta}{\pi}$ for racional, os estados Z_{2k-1} e Z_{2k} são simplesmente algum estado já gerado por algum ciclo de CCAPI-CCP ou são estados que serão repetidos em algum ciclo de CCAPI-CCP posterior (lembre-se que os ciclos de CCAPI-CCP são finitos e pode ser necessário um número finito de ciclos de CCAPI-CCP para gerar todos os estados possíveis). Para $\frac{\theta}{\pi}$ irracional, os estados são naturalmente distintos de z_{2k-1} e z_{2k} .

Colisão P após CCP

Esta situação acontecerá se a velocidade da **1** for negativa. Como as etapas para se chegar em uma configuração de um novo ciclo de CCAPI-CCP, os resultados formais são os mesmos do caso imediatamente acima.

Colisão AP completa após CCP

A colisão AP completa só pode acontecer se as partículas saírem em sentidos opostos após a colisão p-p. As etapas até se ter uma configuração de um novo ciclo de CCAPI-CCP são:

1. ambas as partículas colidem nas paredes: $-z_{4N-3} = -e^{i(2N-1)\theta} \overline{z_0}$;
2. colisão p-p: $e^{i\theta} \overline{(-z_{4N-3})} = -e^{-i2(N-1)\theta} z_0$;
3. colisão p-w de 1: $-\overline{(-e^{-i2(N-1)\theta} z_0)} = e^{i2(N-1)\theta} \overline{z_0} \equiv Z_0$, o estado inicial para o novo ciclo de CCAPI-CCP.

Logo, procedendo como na colisão AP incompleta após CCP, obtemos:

$$Z_{2k-1} = e^{-i[2(N-1)\theta+\pi]} z_{2k}, \quad Z_{2k} = e^{i[2(N-1)\theta+\pi]} z_{2k-1}. \quad (4.50)$$

Os comentários a respeito de $\frac{\theta}{\pi}$ para as Eqs. (4.49) aplicam-se para as Eqs. (4.50).

Portanto, essas colisões simplesmente funcionam como uma transição entre ciclos de CCAPi-CCP para outro ciclo distinto em geral, ou seja, como números racionais formam um conjunto de medida nula, a maioria dos casos serão para $\frac{\theta}{\pi}$ irracional e, por isso, a maioria dos ciclos serão diferentes entre si.

Conclusão

A intenção desse trabalho foi entender a lenta geração de velocidades ou a quebra de ergodicidade, uma vez que o sistema possui as condições necessárias, mas insuficientes, para tal quando o parâmetro $\frac{\theta}{\pi}$ associado à razão das massas for irracional. O sistema de 2 partículas em uma caixa unidimensional, e seu equivalente bilhar triângulo retângulo, tem sido investigado há 40 anos [29] e tem se mostrado desafiador quanto a total compreensão de suas propriedades dinâmicas, apesar de sua simplicidade.

Vimos que colisões entre 2 partículas em uma caixa unidimensional ocorre em 3 configurações de movimento distintos (paralelo, antiparalelo completo e incompleto). Identificamos que CCP e CCAPC ocorrem para razões de massas $\gamma \in (0, \frac{1}{3})$ e $\gamma \in (3, \infty)$, coexistindo com colisões AP completas para razões de massas, como $\gamma = 4$. Mas, seguramente, no intervalo $\gamma \in [\frac{1}{3}, 3]$, predominam CCAPC. A ideia dessas caracterizações é identificar, através de suas propriedades, os mecanismos geradores de novos estados. Por exemplo, já se sabe na literatura [26] que colisões AP completas, de acordo com nossa abordagem e nomenclatura, são responsáveis pela lenta geração de estados ou quebra de ergodicidade. Além disso, a maioria dos resultados numéricos [26–28] remetiam às razões de massas em torno da unidade. Então, consideramos a investigar detalhadamente, por meio de experimentos numéricos e descrição analítica, a geração de estados quando a massa de uma das partículas é muito maior que a da outra.

Notamos na abordagem analítica que são possíveis muitos estados nesse caso, pois são, efetivamente, rotações no espaço de velocidades normalizadas. Para nossa surpresa, não observamos numericamente diferença significativa no número de estados em relação aos casos onde as massas das partículas são da mesma ordem de grandeza. Então, conseguimos mostrar que, quando as CCP são interrompidas por uma colisão AP completa, se gera um novo ciclo de colisões consecutivas e, portanto, um novo conjunto de esta-

dos. Este conjunto de estados são os negativos daqueles do ciclo de CC-API-CCP que foi interrompido primeiro, porque colisões AP completas são rotações de π rad, como já mencionamos. Por ser um ciclo de CC-API-CCP, há uma grande chance dessas CCP serem interrompidas por outra colisão AP completa. O estado gerado é algum do ciclo inicial e o sistema gera novamente os mesmos estados anteriores ou até se gerar todos os estados possíveis do ciclo, ou ainda ser interrompido novamente por uma colisão AP completa. Essas interrupções são mais prováveis do que se completar todos os estados possíveis do ciclo, porque, para isto as posições de colisão iniciais das CCP devem estar muito próximas da extremidade em 0 do intervalo $[0, L]$, mas, como provamos, isto não acontece. O sistema gera muitas vezes os mesmos estados até se gerar um condição que aproxime alguma posição de colisão inicial em 0. Por isso, na Fig. 4.20 distinguimos as transições entre os tipos de colisão por linhas contínuas (baixa probabilidade de ocorrência) e linhas descontínuas (alta probabilidade de ocorrência). Esta situação é agravada à medida que se afasta a razão das massas das partículas da unidade pois, com isso, aumenta-se também o número máximo N de estados possíveis nos ciclos, elevando-se ainda mais a probabilidade de interrupções por colisões AP completas. Ainda que se complete o ciclo, gerando um novo e, por conseguinte mais estados novos, se está na mesma condição de alta probabilidade de ocorrência de uma colisão AP completa, recaindo novamente no ciclo de CC-API-CCP inicial. A outra possível saída encontrada foi investigar o que aconteceria, uma vez completado o ciclo de CC-API-CCP, se ocorresse uma colisão P, AP incompleta ou AP completa. Como vimos, essas colisões simplesmente funcionam como uma transição de um ciclo de colisões consecutivas para outro igualmente sujeito as propriedades de se gerar os mesmos estados. A diferença com os ciclos interrompidos por colisões AP completas está na independência imediata do ciclo anterior, ou seja, não necessariamente acontecerá alguma colisão que retorne a um ciclo inicial (pelo menos para $\frac{\theta}{\pi}$ irracional). Então, independentemente da razão das massas, as colisões AP completas sempre estão presentes e contribuem diretamente para a quebra da ergodicidade. Essa permanência por um tempo muito grande nos ciclos seria uma questão a se aprofundar. Um estudo numérico nesta direção foi realizada por J. Wang e colaboradores [36], que encontraram evidências de ausência de ergodicidade para $\gamma \approx 2,14$, cujo $\frac{\theta}{\pi}$ é a razão áurea (o número mais irracional do ponto de vista de convergência por racionais).

Com este trabalho, ainda que não provamos se é ou ergódico, esclarecemos os mecanismos que frustram a geração de novas velocidades para qualquer razão das massas e desenvolvemos interpretações e ferramentas que possam ser utilizadas para tal demonstração rigorosa. Isto é importante porque, se o sistema não for ergódico de fato, será um exemplo simples, com condições necessárias bem estabelecidas, onde a dinâmica tem forte

influência no comportamento do sistema.

O estudo desse sistema permitiu vislumbrar algumas perspectivas de desenvolvimento do trabalho:

- Investigar se há outras condições que levam à periodicidade de trajetórias no bilhar triângulo retângulo (como a presença de 3, 4, etc. posições de colisão da partícula no bilhar);
- Investigar a existência de uma lei estatística clara que identifique as razões das massas para as quais predominam cada uma das três colisões consecutivas;
- Avançar o estudo para resolver o dissenso quanto à ergodicidade para este sistema.

Ergodicidade em Sistemas Simples

A.1 Oscilador Harmônico Simples Unidimensional

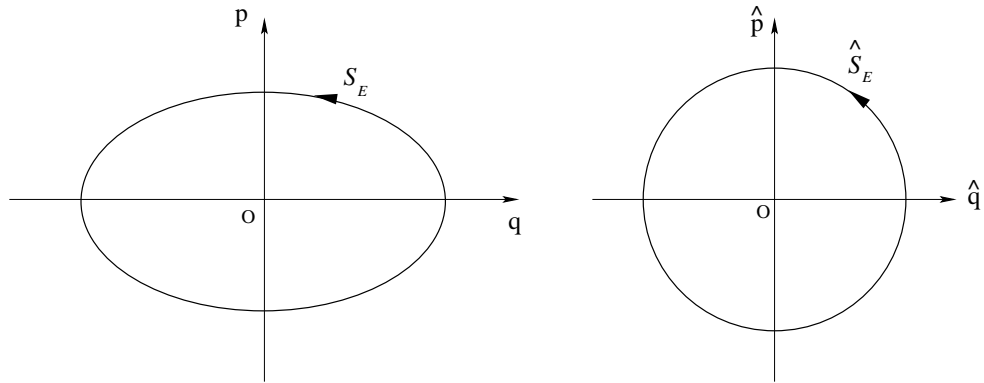


Figura A.1: (a) Espaço de Fase do Oscilador Harmônico Simples com uma superfície de energia S_E . (b) Espaço de Fase normalizado do Oscilador Harmônico Simples com uma superfície de energia \hat{S}_E .

O Oscilador Harmônico Simples é conservativo, então $\mathcal{H}(q, p) = E$,

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} = E, \quad (\text{A.1})$$

sendo m a massa e ω a frequência angular. A Eq. (A.1) mostra que a superfície de energia S_E é uma elipse. Para mostrar que a média temporal é igual a média espacial, utilizaremos a representação complexa do Espaço de Fase. Definindo $\hat{p} = \frac{p}{\sqrt{2mE}}$ e $\hat{q} = \frac{\omega q}{\sqrt{2m^{-1}E}}$, temos $\hat{p}^2 + \hat{q}^2 = 1$, de modo que a superfície de energia nesse Espaço de Fase normalizado é uma circunferência unitária; logo, pelo isomorfismo do plano real e o conjunto dos números complexos, representamos o par (\hat{p}, \hat{q}) , como o número complexo $z = \hat{p} + i\hat{q}$. Como a frequência independe do tempo, os momentos e as posições variam harmonicamente,

$z = z_0 e^{i\omega t}$, que é solução da equação diferencial [57]

$$\frac{dz}{dt} = i\omega z. \quad (\text{A.2})$$

Calculemos a média temporal de uma grandeza física representada por uma função $f(z(t))$ em um período de tempo T e usamos a Eq. (A.2) para substituir a integração em dt pela integração dz sobre a superfície de energia \hat{S}_E ,

$$\langle f \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T f(z(t)) dt = \frac{1}{i\omega T} \oint_{\hat{S}_E} f(z) \frac{dz}{z} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\hat{S}_E} f(z) d\mu(z) = \langle f \rangle, \quad (\text{A.3})$$

em que $\omega T = 2\pi$, $d\mu(z) = \frac{dz}{z}$. Logo, as médias temporal e espacial são iguais, provando a ergodicidade do OHS.

A.2 O Mapa de Rotações

Rotações sobre uma circunferência de raio unitário \mathbb{S}^1 podem ser representadas via números complexos: seja $z_0 = e^{i\alpha}$ uma posição em \mathbb{S}^1 ; a rotação de z_0 por um ângulo θ dá um novo número complexo $z_1 = e^{i\theta} z_0$ em \mathbb{S}^1 , dando

$$z_1 = e^{i(\theta+\alpha)} = e^{i\phi},$$

mostrando que em uma rotação, efetivamente se adiciona ângulos. Então, definimos o Mapa de Rotação por um ângulo real θ a partir de uma posição angular inicial x por $\phi : x \rightarrow \phi(x) = x + \theta, \text{ mod } 2\pi$. Para n rotações, temos $\phi^n : x \rightarrow \phi(x) = x + n\theta, \text{ mod } 2\pi$. Para θ racional, as rotações na circunferência unitária são periódicas, implicando na não ergodicidade neste caso, pois a trajetória do sistema gasta tempos diferentes de permanência em regiões diferentes. Assumamos daqui em diante que θ é irracional.

Considere a média temporal de uma função $f(x)$ para uma trajetória iniciando-se em x ,

$$\langle f \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f(\phi^k(x)) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f(x + k\theta).$$

Expandindo em série de Fourier a função $f(x + k\theta)$,

$$f(x + k\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{i(kx + n\theta)},$$

invertendo os somatórios e resolvendo a soma em k , obtemos

$$\langle f \rangle = a_0 + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n \neq 0} a_n \frac{1 - e^{iNn\theta}}{1 - e^{in\theta}} e^{in\theta}. \quad (\text{A.4})$$

Como θ é irracional, os pontos sobre a circunferência é densa e equidistribuída; logo, o somatório da Eq. (A.4) se anula (Teorema de Equidistribuição de Weyl ou Critério de Weyl [79]), dando

$$\langle f \rangle = a_0. \quad (\text{A.5})$$

Sendo a expansão em série de Fourier de $f(x)$,

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{inx},$$

a média espacial dá o mesmo resultado

$$\langle f \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) dx = a_0, \quad (\text{A.6})$$

o que mostra a ergodicidade de rotações.

A.3 Oscilador Harmônico Simples Bidimensional

A prova da ergodicidade do Oscilador Harmônico Simples Bidimensional é a generalização bidimensional do procedimento usado para o Mapa de Rotações.

Grupo Diedral

B.1 Grupo

Seja o conjunto $G \neq \emptyset$ e uma lei de composição interna $(x, y) \mapsto x \star y$ em G . G é um grupo em relação a essa lei, se, e somente se:

1. $(\forall a, b, c \in G)(a \star (b \star c) = (a \star b) \star c)$ (associatividade);
2. $(\forall a \in G)(\exists e \in G)(a \star e = e \star a = a)$ (existência de elemento neutro);
3. $(\forall a \in G)(\exists a' \in G)(a \star a' = a' \star a = e)$ (existência de elemento simétrico).

Como consequência [80], os elementos neutro e simétrico são únicos; dado um elemento qualquer do grupo, o simétrico do simétrico é o próprio elemento; o simétrico de $a \star b$ é $b \star a$.

Um grupo (G, \star) é abeliano ou comutativo se, e somente se, $(x, y) \mapsto x \star y$ é comutativa, ou seja, $(\forall a, b \in G)(a \star b = b \star a)$.

B.2 Grupo Diedral

Grupo Diedral é um grupo de n simetrias (invariância) de rotação e n de reflexão de polígonos n -regulares em torno da origem. Portanto, este grupo possui $2n$ elementos e o denotemos por \mathcal{D}_{2n} .

Dessa forma, as rotações são ângulos múltiplos racionais de π . Então, considere rotações anti-horárias em torno da origem por ângulos $(k - 1)\frac{2\pi}{n}$, com inteiro $k \in [1, n)$,

a n -ésima rotação coincidindo com a rotação $k = 1$, a $(n + 1)$ -ésima rotação coincidindo com a $k = 2$, etc. O conjunto dessas rotações, $R_n = \{e, a, \dots, a^{n-1}\}$, com $a^n = e$, juntamente com a composição de duas rotações quaisquer (o símbolo \star é omitido e a composição de rotações é representada por justaposição) possuem as propriedades definidoras de grupo, denominado de grupo de rotações módulo n [80]. Assim, para dois elementos de rotação quaisquer $a^r, a^s \in R_n$, temos $a^r a^s = a^{r+s}$, $(r + s) \bmod n$ é um elemento de rotação de R_n ; para $s = n - r$, obtemos o elemento neutro do grupo, $a^r a^{n-r} = a^n = e$, ou seja, a^{n-r} é o elemento simétrico de a^r .

A reflexão b do Grupo Diedral é aquela em relação à abscissa, de modo que $b^2 = e$; apliquemos em cada rotação de R_n a reflexão b , obtendo-se explicitamente \mathcal{D}_{2n} ,

$$\mathcal{D}_{2n} = \{e, a, \dots, a^{n-1}, b, ba, \dots, ba^{n-1}\}. \quad (\text{B.1})$$

Os elementos do Grupo Diedral possuem as seguintes propriedades operacionais:

- $ab = ba^{n-1}$;
- $a^r b = ba^{n-r}$.

B.3 Grupo Multiplicativo Cíclico

Grupo Multiplicativo Cíclico G é o grupo fechado em relação à multiplicação que possui um elemento $a \in G$ tal que $G = \{a^m | m \in \mathbb{Z}\}$. Este elemento é dito um gerador de G .

Os Grupos Multiplicativos Cíclicos podem ser:

- **finitos**, quando existe um inteiro não-nulo p tal que $a^p = e$. Se este inteiro for o menor possível, p é dito período ou ordem do grupo;
- **infinitos**, quando não for finito; logo, o período $p = 0$.

O Grupo Diedral é um grupo multiplicativo cíclico, com dois geradores, um correspondendo ao gerador de rotações, a , e o outro, à reflexão, b .

Cálculos Referentes às Colisões Consecutivas

C.1 Colisões Consecutivas Paralelas

Nesta seção, calculamos os estados possíveis gerados e determinamos a condição sobre a posição de colisão inicial para a realização das CCP.

C.1.1 Caso $\gamma > 1$

Condições sobre as velocidades para a ocorrência de CCP

Considere duas partículas movendo-se com velocidades $v_1^{(0)}$ e $v_2^{(0)}$ tais que $0 < v_2^{(0)} < v_1^{(0)}$. As velocidades normalizadas correspondentes são obtidas de $w_i = v_i/\sqrt{2Em_i^{-1}}$, de modo que $\alpha = w_1^{(0)}$ e $\beta = w_2^{(0)}$. Suponha que ocorra consecutivamente as duas situações:

- (i) as partículas colidem paralelamente com velocidades positivas, conforme

$$z = e^{i\theta} \overline{z_0},$$

sendo $\theta \in (0, \pi)$ e $z_0 = \alpha + i\beta$ o estado inicial (ou velocidades iniciais);

- (ii) a partícula **1** colide com a parede, conforme

$$z' = -\overline{z}.$$

Assim, temos

$$\begin{aligned}
 z_1 &= e^{i\theta} \overline{z_0}, \\
 z_2 &= -\overline{z_1} = -e^{-i\theta} z_0, \\
 z_3 &= e^{i\theta} \overline{z_2} = -e^{i2\theta} \overline{z_0}, \\
 z_4 &= -\overline{z_3} = -e^{-i2\theta} z_0, \\
 z_5 &= e^{i\theta} \overline{z_4} = e^{i3\theta} \overline{z_0}, \\
 z_6 &= -\overline{z_5} = -e^{-i3\theta} z_0, \quad \text{etc.},
 \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
 z_{2k-1} &= (-1)^{k+1} e^{ik\theta} \overline{z_0}, \\
 z_{2k} &= (-1)^k e^{-ik\theta} z_0.
 \end{aligned}$$

Explicitamente, temos

$$\begin{aligned}
 z_{2k-1} &= (-1)^{k+1} [\alpha \cos k\theta + \beta \sin k\theta + i(\alpha \sin k\theta - \beta \cos k\theta)] = w_1^{(k)} + iw_2^{(k)}, \\
 z_{2k} &= (-1)^k [\alpha \cos k\theta + \beta \sin k\theta - i(\alpha \sin k\theta - \beta \cos k\theta)] = -w_1^{(k)} + iw_2^{(k)}, \quad (\text{C.1})
 \end{aligned}$$

em que $k > 0$.

São necessárias duas condições para que ocorram as CCP: a velocidade da partícula **1** deve ser negativa e da **2**, positiva após cada colisão p-p, $w_1^{(k)} < 0$ e $w_2^{(k)} > 0$; a **1** deve ser mais rápida que a **2** após cada colisão p-p, $-v_1^{(k)} > v_2^{(k)}$. Tratemos separadamente cada uma dessas condições:

Condição 1: $w_1^{(k)} < 0$ e $w_2^{(k)} > 0$. Pela Eq. (C.1), expressemos $-w_1^{(k)} > 0$ e $w_2^{(k)} > 0$ em termos de α , β , $\cos k\theta$ e $\sin k\theta$ para formar o sistema de inequações,

$$\begin{cases} (-1)^k (\alpha \cos k\theta + \beta \sin k\theta) > 0 \\ (-1)^{k+1} (\alpha \sin k\theta - \beta \cos k\theta) > 0 \end{cases}. \quad (\text{C.2})$$

Multiplicando a primeira equação por $\frac{\alpha}{\beta}$ e adicionando com a segunda, obtemos uma inequação trigonométrica [81], $(-1)^k \cos k\theta > 0$. Temos duas possibilidades:

- k ímpar: $\cos k\theta < 0$, cuja solução geral é

$$\frac{\pi}{2} + 2\pi m < k\theta < \pi + 2\pi m,$$

para todo inteiro $m \geq 0$. Desejamos que esta solução corresponda a um intervalo

(a, π) , com $a > 0$ um número real, tal que $\theta \in (a, \pi) \subset (0, \pi)$. A justificativa para isto é a concordância com o $\lim_{\theta \rightarrow \pi} \gamma = \infty$ (γ é dada pela Eq. (3.12)), para todo k ímpar. Esta condição é satisfeita apenas se $k = 2m + 1$; assim, sendo $2m = k - 1$, a solução da inequação trigonométrica em termos de k é $\frac{2k-1}{2}\pi < k\theta < k\pi$, ou seja, $\theta \in \left(\frac{2k-1}{2k}\pi, \pi\right)$. Então, $\sin k\theta > 0$ e, pela primeira inequação de (C.2), $\frac{\alpha}{\beta} > -\operatorname{tg} k\theta$.

- k par: $\cos k\theta > 0$, cuja solução é

$$\frac{3\pi}{2} + 2\pi m < k\theta < 2\pi + 2\pi m,$$

para todo inteiro $m \geq 0$. De maneira análoga ao caso de k ímpar, mas com $k = 2(m + 1)$, obtemos $\theta \in \left(\frac{2k-1}{2k}\pi, \pi\right)$. Por conseguinte, $\sin k\theta < 0$ e, da primeira inequação de (C.2), obtemos também $\frac{\alpha}{\beta} > -\operatorname{tg} k\theta$.

Portanto, para todo inteiro $k > 0$, a condição 1 é garantida, desde que

$$\frac{\alpha}{\beta} > -\operatorname{tg} k\theta, \quad \theta \in \left(\frac{2k-1}{2k}\pi, \pi\right).$$

Condição 2: $-v_1^{(k)} > v_2^{(k)}$; mudando para velocidades normalizadas, temos

$$\frac{-w_1^{(k)}}{\sqrt{m_1}} > \frac{w_2^{(k)}}{\sqrt{m_2}} \Rightarrow -w_1^{(k)} \sin \frac{\theta}{2} > w_2^{(k)} \cos \frac{\theta}{2}. \quad (\text{C.3})$$

- Para k ímpar:

$$w_1^{(k)} = \alpha \cos k\theta + \beta \sin k\theta, \quad w_2^{(k)} = \alpha \sin k\theta - \beta \cos k\theta,$$

cuja substituição em (C.3) resulta em

$$-\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} > -\beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}. \quad (\text{C.4})$$

Mas $\cos k\theta < 0$ e $\sin k\theta > 0$, de modo que $-\cos \frac{(2k+1)\theta}{2} > 0$. Em vista disso, da relação (C.4), obtemos $\operatorname{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2} > \frac{\beta}{\alpha}$.

- Para k par: procedendo-se de maneira análoga ao caso de k ímpar acima, obtemos também $\operatorname{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2} > \frac{\beta}{\alpha}$.

Logo, para todo inteiro $k > 0$, $\operatorname{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2} > \frac{\beta}{\alpha}$.

Para se determinar o intervalo de validade desta relação, note que $\frac{\beta}{\alpha} > 0$, dando a inequação $\operatorname{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2} > 0$. A sua solução geral é $m\pi < (2k+1)\frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{2} + m\pi$, ou seja,

$\frac{2m\pi}{2k+1} < \theta < \frac{2m+1}{2k+1}\pi$. Para que o intervalo fique limitado superiormente por π , definimos $m = k$, dando

$$\theta \in \left(\frac{2k}{2k+1}\pi, \pi \right). \quad (\text{C.5})$$

Portanto, a condição 2 é satisfeita, desde que

$$\frac{\alpha}{\beta} > \frac{1}{\text{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2}}, \quad \theta \in \left(\frac{2k}{2k+1}\pi, \pi \right).$$

A partir do intervalo (C.5), estimamos o número máximo de CCP possíveis,

$$\frac{2k_m}{2k_m+1}\pi < \theta \Rightarrow k_m < \frac{\theta}{2(\pi - \theta)},$$

em que $k_m = k$ é o máximo inteiro que satisfaz (C.5). Mas, nesta estimativa se exclui a condição inicial que também é uma colisão paralela; então, o número máximo total de CCP é $N = k_m + 1$, ou seja,

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)}.$$

A seguir, apresentamos exemplos para mostrar alguns valores de N se conhecermos θ ou γ .

Exemplo 1: Seja $\theta = \frac{\pi}{3}$ ($\gamma = \frac{1}{3}$). Então,

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)} = 1,25,$$

ou seja, $N = 1$ colisão.

Exemplo 2: Seja $\theta = 1,91063\dots$ rad ($\gamma = 2$). Então,

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)} = 1,776074,$$

ou seja, também $N = 1$ colisão.

Exemplo 3: Seja $\theta = 2,21429\dots$ rad ($\gamma = 4$). Então,

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)} = 2,194,$$

ou seja, são possíveis 2 colisões ($N = 2$).

Exemplo 4: Seja $\theta = 2,52903\dots$ rad ($\gamma = 10$). Então,

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)} = 3,064,$$

ou seja, são possíveis 3 colisões ($N = 3$).

Exemplo 5: Seja $\theta = 2,97865\dots$ rad ($\gamma = 150$). Então,

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)} = 10,140,$$

ou seja, são possíveis 10 colisões ($N = 10$).

Condição sobre a posição de colisão para a ocorrência de CCP

Suponha que as partículas confinadas em $[0, L]$ se movam com velocidades iniciais tais que $0 < v_2^{(0)} < v_1^{(0)}$; assim, elas colidirão em uma posição inicial x_0 , da qual partem em sentido opostos, com velocidades $v_1 < 0$ e $v_2 > 0$. As equações horárias das posições são

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + v_1 t_1 \\ x_2 = x_0 + v_2 t_2 \end{cases}.$$

Os valores dos tempos para cada partícula chegar às paredes correspondentes são $t_1 = -\frac{x_0}{v_1}$ e $t_2 = \frac{L-x_0}{v_2}$. Para que a colisão p-p seguinte seja P, é preciso primeiramente que $t_1 < t_2$. Assim, a partícula **1** chega antes na parede que a **2**, a qual se encontra na nova posição inicial $x_2(t_1)$. Então, as novas equações horárias das posições são

$$\begin{cases} x'_1 = -v_1 t'_1 \\ x'_2 = x_2(t_1) + v_2 t'_2 \end{cases}.$$

Para que se realize uma colisão P, o tempo t'_1 para a **1** chegar em L deve ser menor que o tempo t'_2 para a **2**, $t'_1 = -\frac{L}{v_1} < \frac{L-x_2(t_1)}{v_2} = t'_2$. Desta desigualdade, obtemos

$$\frac{x_0}{L} < \frac{|v_1| - |v_2|}{|v_1| + |v_2|}.$$

Como estamos tratando de colisões consecutivas, precisamos ter a relação acima para um número qualquer de CCP, que é facilitado se as velocidades forem normalizadas. Assim, como $v_i = \sqrt{\frac{2E}{m_i}} w_i$, temos

$$|v_1| \pm |v_2| = \frac{1}{\sqrt{\mu}} \left(|w_1| \sin \frac{\theta}{2} \pm |w_2| \cos \frac{\theta}{2} \right),$$

em que M é a massa total, μ é a massa reduzida, $\sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{m_2}{M}}$ e $\cos \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{m_1}{M}}$. Logo,

$$\frac{x_0}{L} < \frac{|v_1| - |v_2|}{|v_1| + |v_2|} = \frac{|w_1| \sin \frac{\theta}{2} - |w_2| \cos \frac{\theta}{2}}{|w_1| \sin \frac{\theta}{2} + |w_2| \cos \frac{\theta}{2}}.$$

Assumindo $k + 1$ CCP,

$$\frac{x_0^{(k)}}{L} < \frac{|w_1^{(k)}| \sin \frac{\theta}{2} - |w_2^{(k)}| \cos \frac{\theta}{2}}{|w_1^{(k)}| \sin \frac{\theta}{2} + |w_2^{(k)}| \cos \frac{\theta}{2}},$$

e substituindo

$$|w_1^{(k)}| = -w_1^{(k)} = (-1)^k (\alpha \cos k\theta + \beta \sin k\theta), \quad |w_2^{(k)}| = w_2^{(k)} = (-1)^{k+1} (\alpha \sin k\theta - \beta \cos k\theta),$$

obtemos

$$\frac{x_0^{(k)}}{L} < -\frac{\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} - \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}{\alpha \sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \beta \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}},$$

a qual pode ser expressa também como

$$\frac{x_0^{(k)}}{L} < -\frac{\sin \frac{(2k+1)\theta}{2} - \frac{\beta}{\alpha} \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}{\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \frac{\beta}{\alpha} \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}}, \quad \text{ou} \quad \frac{x_0^{(k)}}{L} < -\frac{\sin \frac{(2k+1)\theta}{2} - \left(\sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}} \right) \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}{\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \left(\sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}} \right) \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}},$$

em que $\frac{\beta}{\alpha} = \sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}}$.

Para apresentarmos algumas estimativas para $\frac{x_0^{(k)}}{L}$, precisamos da relação entre as velocidades iniciais. Já conhecemos esta relação em termos de velocidades normalizadas: $\alpha > \frac{\beta}{\tan \frac{(2k+1)\theta}{2}}$. Contudo, derivaremos uma relação equivalente em termos das velocidades iniciais $v_1^{(0)}$ e $v_2^{(0)}$, cuja relação será mais intuitiva fisicamente. Supondo que as velocidades iniciais das partículas sejam tais que $0 < v_2^{(0)} < v_1^{(0)}$ e que a posição de colisão inicial seja $x_0 = x_0^{(0)}$, as velocidades das partículas imediatamente após a colisão p-p serão, de acordo com a Eq. (3.5),

$$v_1^{(1)} = \frac{(1 - \gamma)v_1^{(0)} + 2\gamma v_2^{(0)}}{1 + \gamma},$$

$$v_2^{(1)} = \frac{2v_1^{(0)} + (\gamma - 1)v_2^{(0)}}{1 + \gamma}.$$

Para que a colisão p-p seja P, devemos ter $-v_1^{(1)} > v_2^{(1)}$, com $v_1^{(1)} < 0$ e $v_2^{(1)} > 0$. Logo,

$$v_1^{(0)} > \frac{3\gamma - 1}{\gamma - 3} v_2^{(0)}.$$

Esta relação mostra que as partículas sairão em sentidos opostos, com a **1** mais rápida

que a **2**, somente se $\gamma > 3$, como havíamos concluído através da (4.5). O exemplo abaixo ilustra que a ocorrência de CCP se dá apenas se a posição de colisão inicial estiver muito próxima da extremidade em 0 de $[0, L]$.

Exemplo 6: Para $\gamma = 3, 1$, temos $\theta = 2, 10853... \text{ rad} \approx 120, 8^\circ$, $k = N - 1 = 1$ e $v_1^{(0)} > 83v_2^{(0)}$. Então, escolhamos $v_1^{(0)} = 84v_2^{(0)}$; logo,

$$\frac{x_0^{(1)}}{L} < 2, 94 \times 10^{-4}.$$

C.1.2 Caso $\gamma < 1$

Condições sobre as velocidades para a ocorrência de CCP

Seja o estado inicial $z_0 = -\alpha - \imath\beta$, com $0 < \alpha = w_1^{(0)}$ e $0 < \beta = w_2^{(0)}$. Como antes, suponha que ocorra consecutivamente as duas situações:

- (i) as partículas colidem paralelamente com velocidades negativas, conforme

$$z = e^{\imath\theta}\overline{z_0},$$

em que $\theta \in (0, \pi)$;

- (ii) a partícula **2** colide com a parede, conforme

$$z' = \overline{z}.$$

Assim, temos

$$z_1 = e^{\imath\theta}\overline{z_0},$$

$$z_2 = \overline{z_1} = e^{-\imath\theta}z_0,$$

$$z_3 = e^{\imath\theta}\overline{z_2} = e^{\imath 2\theta}\overline{z_0},$$

$$z_4 = \overline{z_3} = e^{-\imath 2\theta}z_0,$$

$$z_5 = e^{\imath\theta}\overline{z_4} = e^{\imath 3\theta}\overline{z_0},$$

$$z_6 = \overline{z_5} = e^{-\imath 3\theta}z_0, \quad \text{etc.},$$

ou seja,

$$z_{2k-1} = e^{ik\theta} \overline{z_0},$$

$$z_{2k} = e^{-ik\theta} z_0.$$

Explicitamente, temos

$$z_{2k-1} = -\alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta + i(-\alpha \sin k\theta + \beta \cos k\theta) = w_1^{(k)} + iw_2^{(k)},$$

$$z_{2k} = -\alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta + i(\alpha \sin k\theta - \beta \cos k\theta) = w_1^{(k)} - iw_2^{(k)},$$

em que $w_1^{(k)} < 0$ e $w_2^{(k)} > 0$.

Para que ocorram as CCP, são necessárias duas condições: a velocidade da **1** deve ser negativa e da **2**, positiva imediatamente após cada colisão p-p, $w_1^{(k)} < 0$ e $w_2^{(k)} > 0$; a **2** deve ser mais rápida que **1** após cada colisão p-p, $-v_1^{(k)} < v_2^{(k)}$. Vejamos separadamente cada uma dessas condições:

Condição 1: $w_1^{(k)} < 0$ e $w_2^{(k)} > 0$. Procedendo-se de maneira análoga ao caso $\gamma > 1$, formamos um sistema de duas inequações a duas variáveis com as velocidades $-w_1^{(k)} > 0$ e $w_2^{(k)} > 0$, obtendo-se a inequação $\cos k\theta > 0$. Como o nosso caso se refere a $\gamma \in (0, 1)$, então $\theta \in (0, \frac{\pi}{2})$. Dessa forma, a solução geral apropriada para $\cos k\theta > 0$ é

$$2\pi m < k\theta < \frac{\pi}{2} + 2\pi m,$$

para todo $m \geq 0$. Em particular, sendo $m = 0$, a solução acima fica $k\theta \in (0, \frac{\pi}{2})$, ou seja, $\theta \in (0, \frac{\pi}{2k})$, para todo inteiro $k > 0$. Note que $\theta \in (0, \frac{\pi}{2k}) \subset (0, \pi)$. Além disso, para valores crescentes de k , $\frac{\pi}{2k}$ aproxima-se de 0, ou seja, $\theta \rightarrow 0$. Isto é desejável, pois $\gamma \rightarrow 0$, o que significa que $\gamma^{-1} \rightarrow \infty$ quando se aumenta a diferença entre as massas das partículas, como também ocorre para o caso $\gamma > 1$. Consequentemente, $\sin k\theta > 0$. Como $w_2^{(k)} = -\alpha \sin k\theta + \beta \cos k\theta > 0$, segue-se que a condição 1 é garantida para todo inteiro $k > 0$, contanto que

$$\frac{\alpha}{\beta} < \frac{1}{\tan k\theta}, \quad \theta \in (0, \frac{\pi}{2k}).$$

Condição 2: $-v_1^{(k)} < v_2^{(k)}$. Expressemos $-v_1^{(k)} < v_2^{(k)}$ em termos de velocidades normalizadas,

$$\frac{-w_1^{(k)}}{\sqrt{m_1}} < \frac{w_2^{(k)}}{\sqrt{m_2}} \Rightarrow -w_1^{(k)} \sin \frac{\theta}{2} < w_2^{(k)} \cos \frac{\theta}{2},$$

e substituindo $w_1^{(k)}$ e $w_2^{(k)}$, obtemos

$$\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} < \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}.$$

Como $\cos k\theta > 0$, $\sin k\theta > 0$, $\cos \frac{\theta}{2} > 0$ e $\sin \frac{\theta}{2} > 0$, temos $\sin \frac{(2k+1)\theta}{2} = \sin k\theta \cos \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2} \cos k\theta > 0$; logo, $\alpha < \frac{\beta}{\operatorname{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2}}$. Mas, $\frac{\alpha}{\beta} > 0$, então $\operatorname{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2} > 0$; assim sendo, $\cos \frac{(2k+1)\theta}{2} > 0$ e, por conseguinte, $0 < \frac{(2k+1)\theta}{2} < \frac{\pi}{2}$. Portanto, a condição 2 é garantida, desde que

$$\frac{\alpha}{\beta} < \frac{1}{\operatorname{tg} \frac{(2k+1)\theta}{2}}, \quad \theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k+1}\right).$$

Em particular, se $k = 1$, então $\theta \in \left(0, \frac{\pi}{3}\right)$, ou seja, $\gamma < \frac{1}{3}$ para que ocorram CCP.

Este intervalo de valores válidos para θ permite estimar o número de CCP de maneira análoga ao feito para o caso $\gamma > 1$, dando $k_m < \frac{\pi-\theta}{2\theta}$. Para incluir a colisão P inicial, definimos o número máximo total de CCP como $N = k_m + 1$, ou seja,

$$N < \frac{\pi + \theta}{2\theta}.$$

Exemplo 7: Seja $\gamma = 1/2$; logo, $\theta = 1,23\dots \text{ rad} \approx 70,5^\circ$. Assim,

$$N < \frac{\pi + \theta}{2\theta} = 1,776,$$

ou seja, $N = 1$ colisão.

Exemplo 8: Seja $\gamma = 1/4$; logo, $\theta = 0,92\dots \text{ rad} \approx 53,1^\circ$. Assim,

$$N < \frac{\pi + \theta}{2\theta} = 2,19,$$

ou seja, $N = 2$ colisões.

Exemplo 9: Seja $\gamma = 0,10$; então $\theta = 0,6125\dots \text{ rad} \approx 35,1^\circ$; logo,

$$N < \frac{\pi + \theta}{2\theta} = 3,06,$$

ou seja, $N = 3$ colisões.

Condição sobre a posição de colisão para a ocorrência de CCP

O procedimento aqui também é análogo ao caso $\gamma > 1$. Sendo as velocidades $v_1 < 0$ e $v_2 > 0$ e a posição de colisão x_0 , determinamos, através das equações horárias das posições, o tempo necessário para cada partícula chegar até as paredes e impomos que a **2** chegue antes em L que a **1** em 0, $t_2 = \frac{L-x_0}{v_2} < -\frac{x_0}{v_1} = t_1$. Por meio das novas equações horárias de posição,

$$\begin{cases} x'_1 = x_1(t_2) + v_1 t'_1 \\ x'_2 = L - v_2 t'_2 \end{cases},$$

determinamos o tempo necessário para cada uma das partículas chegar em 0. Estabelecendo que $t'_2 = \frac{L}{v_2} < -\frac{x_1(t_2)}{v_1} = t'_1$, a **2** colidirá com a **1** antes que esta chegue à parede. Disto resulta em

$$\frac{x_0}{L} > \frac{2|v_1|}{|v_1| + |v_2|},$$

que é a condição sobre a posição de colisão para que ocorra colisão P. Em velocidades normalizadas, temos

$$\frac{x_0}{L} > \frac{2|w_1| \sin \frac{\theta}{2}}{|w_1| \sin \frac{\theta}{2} + |w_2| \cos \frac{\theta}{2}}.$$

Assumindo $k + 1$ CCP,

$$\frac{x_0^{(k)}}{L} > \frac{2|w_1^{(k)}| \sin \frac{\theta}{2}}{|w_1^{(k)}| \sin \frac{\theta}{2} + |w_2^{(k)}| \cos \frac{\theta}{2}},$$

e re-escrevendo em termos das velocidades iniciais, obtemos

$$\frac{x_0^{(k)}}{L} > -\frac{2\left(\cos k\theta + \frac{\beta}{\alpha} \sin k\theta\right) \sin \frac{\theta}{2}}{\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \frac{\beta}{\alpha} \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}} \quad \text{ou} \quad \frac{x_0^{(k)}}{L} > -\frac{2\left(\cos k\theta + \left(\sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}}\right) \sin k\theta\right) \sin \frac{\theta}{2}}{\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} - \left(\sqrt{\gamma} \frac{v_2^{(0)}}{v_1^{(0)}}\right) \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}},$$

Derivemos agora a relação entre as velocidades $v_1^{(0)}$ e $v_2^{(0)}$ para podermos estimar $\frac{x_0^{(k)}}{L}$ para um caso simples. Supondo que as partículas se movam com velocidades negativas, em que $0 < v_1^{(0)} < v_2^{(0)}$, as velocidades imediatamente depois da colisão p-p são

$$v_1^{(1)} = \frac{(1 - \gamma)(-v_1^{(0)}) + 2\gamma(-v_2^{(0)})}{1 + \gamma},$$

$$v_2^{(1)} = \frac{2(-v_1^{(0)}) + (\gamma - 1)(-v_2^{(0)})}{1 + \gamma}.$$

Para que a colisão p-p seja P, devemos ter $-v_1^{(1)} < v_2^{(1)}$, dando

$$v_2^{(0)} > \frac{3 - \gamma}{1 - 3\gamma} v_1^{(0)}.$$

Esta relação mostra que as partículas sairão em sentidos opostos, com a **2** mais rápida que a **1**, somente se $\gamma < \frac{1}{3}$, como já constatamos acima. O exemplo abaixo ilustra que a realização das CCP se dá somente se a posição de colisão inicial estiver muito próxima da extremidade em L de $[0, L]$.

Exemplo 10: Para $\gamma = 1/4$, temos $\theta = 0,92729... \text{ rad} \approx 53,13^\circ$, $k = N - 1 = 1$ e $v_2^{(0)} > 11v_1^{(0)}$. Escolhendo $v_2^{(0)} = 12v_1^{(0)}$, temos

$$\frac{x_0}{L} > 0,9818.$$

C.2 Colisões Consecutivas Antiparalelas Incompletas

A determinação das condições para a ocorrência de CCAPI é semelhante ao realizado para as CCP. Veremos que os resultados para os dois tipos de colisões consecutivas são parecidos. Em vista disso, omitimos os detalhes que julgamos desnecessários.

C.2.1 Caso $\gamma > 1$

Considere $0 < \alpha = w_1^{(0)}$ e $0 < \beta = w_2^{(0)}$ as velocidades iniciais normalizadas das partículas e que o estado inicial, imediatamente antes da colisão p-p, seja $z_0 = \alpha - i\beta$. Imediatamente após a colisão p-p, as partículas saem com velocidades negativas. Então, a partícula **1** é refletida na parede e colidirá novamente com a **2**. Este processo repetir-se-á até que a velocidade da **2** se torne positiva, independentemente se a velocidade da **1** é positiva ou negativa após esta última colisão AP incompleta. Esta sequência de colisões está sumariado em um roteiro similar ao das CCP:

- (i) as partículas colidem antiparalelamente, conforme

$$z = e^{i\theta} \overline{z_0},$$

em que $\theta \in (0, \pi)$, a partícula **1** possui velocidade positiva e a **2**, velocidade negativa, imediatamente antes da colisão p-p;

(ii) a partícula **1** colide com a parede, conforme

$$z' = -\bar{z}.$$

Como resultado, os estados gerados pelas sucessivas colisões AP incompletas são

$$z_{2k-1} = (-1)^{k+1} e^{ik\theta} \bar{z}_0 = w_1^{(k)} + iw_2^{(k)},$$

$$z_{2k} = (-1)^k e^{-ik\theta} z_0 = -w_1^{(k)} + iw_2^{(k)},$$

em que

$$w_1^{(k)} = (-1)^{k+1} (\alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta) < 0,$$

$$w_2^{(k)} = (-1)^{k+1} (\alpha \sin k\theta + \beta \cos k\theta) < 0.$$

Duas condições são necessárias para se realizar as CCAPI:

Condição 1: $w_1^{(k)} < 0$ e $w_2^{(k)} < 0$. Sendo $-w_1^{(k)} > 0$ e $-w_2^{(k)} > 0$, o sistema de inequações correspondente é

$$\begin{cases} (-1)^k (\alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta) > 0 \\ (-1)^k (\alpha \sin k\theta + \beta \cos k\theta) > 0 \end{cases}. \quad (\text{C.6})$$

Multiplicando a primeira inequação por $\frac{\alpha}{\beta}$ e adicionando com a segunda inequação, obtemos $(-1)^k \cos k\theta > 0$. Há duas possibilidades:

- k ímpar: $\cos k\theta < 0$. Como já vimos para o caso das CCP, a solução é $\theta \in \left(\frac{2k-1}{2k}\pi, \pi\right)$; logo, $\sin k\theta > 0$. A primeira inequação de (C.6) nos fornece $\frac{\alpha}{\beta} > \tan k\theta$; mas este resultado é inútil, pois a condição $\frac{\alpha}{\beta} > 0$ já foi estabelecida nas condições iniciais e $\tan k\theta < 0$, ou seja, $\tan k\theta$ não restringe $\frac{\alpha}{\beta}$ com nenhum valor positivo. Então, apelamos para a segunda inequação de (C.6), a qual nos dá $\frac{\alpha}{\beta} < -\frac{1}{\tan k\theta}$, ou seja, $\frac{\alpha}{\beta}$ está condicionada a um valor positivo máximo.
- k par: $\cos k\theta > 0$. A sua solução também é $\theta \in \left(\frac{2k-1}{2k}\pi, \pi\right)$, com $\sin k\theta < 0$. E, novamente, pela segunda inequação de (C.6), obtemos $\frac{\alpha}{\beta} < -\frac{1}{\tan k\theta}$.

Portanto, para todo inteiro $k > 0$,

$$\frac{\alpha}{\beta} < -\frac{1}{\tan k\theta}, \quad \theta \in \left(\frac{2k-1}{2k}\pi, \pi\right),$$

garante a validade da condição 1.

Condição 2: $-v_1^{(k)} > -v_2^{(k)}$, em que $v_i^{(k)} < 0$. Como $-v_1^{(k)} > -v_2^{(k)} \Rightarrow v_1^{(k)} < v_2^{(k)}$, esta relação em termos de velocidades normalizadas fica

$$w_1^{(k)} \sin \frac{\theta}{2} < w_2^{(k)} \cos \frac{\theta}{2}. \quad (\text{C.7})$$

- Para k ímpar:

$$w_1^{(k)} = \alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta, \quad w_2^{(k)} = \alpha \sin k\theta + \beta \cos k\theta,$$

cuja substituição em (C.7) resulta em

$$-\alpha \sin \frac{(2k-1)\theta}{2} < \beta \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}.$$

Como $-\cos k\theta > 0$, $\sin k\theta > 0$ e $\frac{\theta}{2}$ está no primeiro quadrante, $\sin \frac{(2k-1)\theta}{2} > 0$; logo, $-\alpha < \frac{\beta}{\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2}}$.

- Para k par: procedendo-se de maneira análoga ao caso k ímpar acima, obtemos também $-\alpha < \frac{\beta}{\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2}}$.

Logo, para todo inteiro $k > 0$, $-\alpha < \frac{\beta}{\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2}}$.

Para se determinar o intervalo de validade desta relação, precisamos saber antes o sinal de $\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2}$. Para que θ seja compatível com valores de $\gamma \in (3, \infty)$, devemos ter $\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2} > 0$. De fato, se não fosse, teríamos $\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2} \leq 0$. A solução geral desta inequação trigonométrica é

$$\frac{\pi}{2} + \pi m \leq \frac{(2k-1)\theta}{2} \leq \pi + \pi m \Rightarrow \frac{(2m+1)\pi}{2k-1} \leq \theta \leq \frac{2(m+1)\pi}{2k-1}, \quad (\text{C.8})$$

para todo inteiro $m \geq 0$. Ora, assim como feito para as CCP, este intervalo deve ser limitado por π (pois corresponde ao limite $\gamma \rightarrow \infty$), bastando encontrar um inteiro $m \geq 0$ em função do inteiro $k > 0$. Para isto, impomos que $\frac{2(m+1)\pi}{2k-1} = \pi$; resolvendo para m em função de k , encontramos $m = \frac{2k-3}{2}$, ou seja, m não é inteiro para todo $k > 0$. Então, não existe nenhum m inteiro que torne a solução da inequação $\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2} \leq 0$ limitada superiormente por π . Isto mostra que, na verdade, $\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2} > 0$.

A solução geral para $\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2} > 0$ é

$$\pi m < \frac{(2k-1)\theta}{2} < \frac{\pi}{2} + \pi m \Rightarrow \frac{2\pi m}{2k-1} < \theta < \frac{(2m+1)\pi}{2k-1}. \quad (\text{C.9})$$

Definindo o inteiro m como $m = k - 1$, obtemos

$$\theta \in \left(\frac{2(k-1)\pi}{2k-1}, \pi \right), \quad (\text{C.10})$$

resultado semelhante àquele das CCP. Portanto, a condição 2 é satisfeita, desde que

$$-\frac{\alpha}{\beta} < \text{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2}, \quad \theta \in \left(\frac{2(k-1)\pi}{2k-1}, \pi \right).$$

Partindo do intervalo (C.10), estimamos o número máximo de CCAPI,

$$\frac{2(k_m-1)}{2k_m-1}\pi < \theta \Rightarrow k_m < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)},$$

ou seja, o número máximo possível de CCAPI é

$$N < \frac{2\pi - \theta}{2(\pi - \theta)},$$

em que $N = k_m + 1$, a fim de incluir a colisão AP incompleta do estado inicial.

C.2.2 Caso $\gamma < 1$

As condições sobre as velocidades normalizadas são as mesmas para o caso $\gamma > 1$. O roteiro da sequência de colisões AP incompletas é:

(i) as partículas colidem antiparalelamente, conforme

$$z = e^{i\theta} \overline{z_0},$$

em que $\theta \in (0, \pi)$, a partícula **1** possui velocidade positiva e a **2**, velocidade negativa, imediatamente antes da colisão p-p;

(ii) a partícula **1** colide com a parede, conforme

$$z' = \overline{z}.$$

Como resultado, os estados gerados pelas sucessivas colisões AP incompletas são

$$z_{2k-1} = e^{ik\theta} \overline{z_0},$$

$$z_{2k} = e^{-ik\theta} z_0,$$

em que

$$w_1^{(k)} = \alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta > 0,$$

$$w_2^{(k)} = \alpha \sin k\theta + \beta \cos k\theta > 0.$$

As duas condições para que ocorram as CCAPs são:

Condição 1: $w_1^{(k)} > 0$ e $w_2^{(k)} > 0$. Partindo destas duas inequações, obtemos que $\cos k\theta > 0$. Logo, a sua solução é a mesma encontrada para o caso $\gamma < 1$ das CCP,

$$\theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k}\right);$$

consequentemente, $\sin k\theta > 0$. Como $w_1^{(k)} = \alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta > 0$, segue-se que a condição 1 é garantida para todo inteiro $k > 0$, contanto que

$$\frac{\alpha}{\beta} > \tan k\theta, \quad \theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k}\right).$$

Condição 2: $v_1^{(k)} < v_2^{(k)}$. Expressando esta condição em velocidades normalizadas, temos

$$w_1^{(k)} \sin \frac{\theta}{2} < w_2^{(k)} \cos \frac{\theta}{2},$$

e substituindo $w_1^{(k)}$ e $w_2^{(k)}$, obtemos

$$-\alpha \sin \frac{(2k-1)\theta}{2} < \beta \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}.$$

Como $\cos k\theta > 0$, $\sin k\theta > 0$ e $\frac{\theta}{2}$ está no primeiro quadrante, segue-se que $\cos \frac{(2k-1)\theta}{2} > 0$; logo, $-\tan \frac{(2k-1)\theta}{2} < \frac{\beta}{\alpha}$. Temos aqui uma situação semelhante ao discutido para o caso $\gamma > 1$ das CCAPs: não se pode ter $\tan \frac{(2k-1)\theta}{2} \leq 0$, pois, se assim fosse, a solução geral seria dada por (C.8). Esta permite ser limitada superiormente por $\frac{\pi}{2}$. De fato, sendo $m \geq 0$ e $k > 0$ inteiro, a imposição de que $\frac{2(m+1)\pi}{2k-1} = \frac{\pi}{2}$ leva à $m = \frac{2k-5}{4}$, uma contradição. Portanto, $\tan \frac{(2k-1)\theta}{2} > 0$.

Como a solução geral de $\tan \frac{(2k-1)\theta}{2} > 0$ é dada por (C.9), para que θ fique limitada superiormente por $\frac{\pi}{2}$, basta definir nesta solução $m = 0$, dando

$$\theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k-1}\right). \quad (\text{C.11})$$

Portanto, a condição 2 é satisfeita, desde que

$$-\frac{\alpha}{\beta} < \frac{1}{\operatorname{tg} \frac{(2k-1)\theta}{2}}, \quad \theta \in \left(0, \frac{\pi}{2k-1}\right).$$

Como $\theta < \frac{\pi}{2k_m-1}$, conforme o intervalo (C.11), segue-se que $k_m < \frac{\pi+\theta}{2\theta}$, ou seja, o número máximo possível de CCAPI, juntamente com a colisão do estado inicial, é

$$N < \frac{\pi + \theta}{2\theta},$$

com $N = k_m + 1$.

C.2.3 Posições de colisão para CCAPI

Seguiremos o mesmo procedimento apresentado na determinação da condição sobre a posição de colisão para a ocorrência de CCP. No entanto, ao invés de uma estimativa, obteremos analiticamente as possíveis posições de colisão exatas para as CCAPI.

Caso $\gamma > 1$:

Suponha que as partículas colidam em x_0 com velocidades $v_1^{(0)} > 0$ e $-v_2^{(0)} < 0$ de tal maneira que, imediatamente após a colisão p-p, as velocidades sejam $v_1 < 0$ e $v_2 < 0$, $|v_1| > |v_2|$ (veja o roteiro da seção C.2.1.). As equações horárias são

$$x_1 = x_0 + v_1 t_1, \quad x_2 = x_0 + v_2 t_2,$$

cujos intervalos de tempo para cada partícula chegar em 0 é

$$t_1 = -\frac{x_0}{v_1}, \quad t_2 = -\frac{x_0}{v_2}.$$

Supondo $t_1 < t_2$, a partícula **1** chega em 0, enquanto a partícula **2** está em

$$x_2(t_1) = x_0 \frac{v_1 - v_2}{v_1}.$$

As novas equações horárias são

$$x'_1 = -v_1 t'_1, \quad x'_2 = x_0 \frac{v_1 - v_2}{v_1} + v_2 t'_2.$$

Pela igualdade $x'_1 = x'_2$, obtemos o tempo e, em seguida, a posição de colisão,

$$t' = \frac{x_0}{-v_1} \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2}, \quad x'_0 = \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} x_0.$$

Como as velocidades após a primeira colisão AP incompleta são negativas, escrevemos:

$$x'_0 = \frac{|v_1| - |v_2|}{|v_1| + |v_2|} x_0,$$

e mudando para velocidades normalizadas,

$$x'_0 = \frac{|w_1| \sin \frac{\theta}{2} - |w_2| \cos \frac{\theta}{2}}{|w_1| \sin \frac{\theta}{2} + |w_2| \cos \frac{\theta}{2}} x_0.$$

Para sucessivas colisões AP incompletas, temos assim

$$x_0^{(k)} = \frac{|w_1^{(k)}| \sin \frac{\theta}{2} - |w_2^{(k)}| \cos \frac{\theta}{2}}{|w_1^{(k)}| \sin \frac{\theta}{2} + |w_2^{(k)}| \cos \frac{\theta}{2}} x_0^{(k-1)},$$

em que

$$|w_1^{(k)}| = (-1)^k (\alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta) > 0, \quad |w_2^{(k)}| = (-1)^k (\alpha \sin k\theta + \beta \cos k\theta) > 0,$$

e $x_0^{(k-1)}$, é a posição de colisão da $k - 1$ colisão AP incompleta.

Substituindo $|w_1^{(k)}|$ e $|w_2^{(k)}|$, temos

$$x_0^{(k)} = -\frac{\alpha \sin \frac{(2k-1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k-1)\theta}{2}}{\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}} x_0^{(k-1)},$$

e em termos de x_0 , as sucessivas colisões ficam

$$x_0^{(k)} = (-1)^k \frac{\alpha \sin \frac{\theta}{2} + \beta \cos \frac{\theta}{2}}{\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}} x_0.$$

Caso $\gamma < 1$:

Suponha que as partículas colidam em x_0 com velocidades $v_1^{(0)} > 0$ e $-v_2^{(0)} < 0$ de tal maneira que, imediatamente após a colisão p-p, as velocidades sejam $v_1 > 0$ e $v_2 > 0$, $|v_1| < |v_2|$ (veja o roteiro da seção **C.2.2.**). Procedendo-se analogamente ao caso anterior, a posição de colisão após a primeira colisão AP incompleta é

$$x'_0 = \frac{2Lv_1 + (v_2 - v_1)x_0}{v_1 + v_2},$$

Passando para velocidades normalizadas,

$$x'_0 = \frac{2Lw_1 \sin \frac{\theta}{2} + (w_2 \cos \frac{\theta}{2} - w_1 \sin \frac{\theta}{2})x_0}{w_1 \sin \frac{\theta}{2} + w_2 \cos \frac{\theta}{2}},$$

as sucessivas posições de colisões são

$$x_0^{(k)} = \frac{2L(\alpha \cos k\theta - \beta \sin k\theta) \sin \frac{\theta}{2} + \left(\alpha \sin \frac{(2k-1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k-1)\theta}{2} \right) x_0^{(k-1)}}{\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}.$$

Em termos de x_0 , temos

$$x_0^{(k)} = \frac{2L \left[\alpha (\cos k\theta + \dots + \cos \theta) - \beta (\sin k\theta + \dots + \sin \theta) \right] \sin \frac{\theta}{2} + \left(\alpha \sin \frac{\theta}{2} + \beta \cos \frac{\theta}{2} \right) x_0}{\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}.$$

Mas,

$$\sum_{n=0}^k \cos n\theta = \frac{\left(\cos \frac{k\theta}{2} \right) \left(\sin \frac{(k+1)\theta}{2} \right)}{\sin \frac{\theta}{2}}, \quad \sum_{n=0}^k \sin n\theta = \frac{\left(\sin \frac{k\theta}{2} \right) \left(\sin \frac{(k+1)\theta}{2} \right)}{\sin \frac{\theta}{2}},$$

e usando esses resultados, obtemos

$$x_0^{(k)} = \frac{2L \left[\alpha \left(\left(\cos \frac{k\theta}{2} \right) \left(\sin \frac{(k+1)\theta}{2} \right) - \sin \frac{\theta}{2} \right) - \beta \left(\sin \frac{k\theta}{2} \right) \left(\sin \frac{(k+1)\theta}{2} \right) \right] + \left(\alpha \sin \frac{\theta}{2} + \beta \cos \frac{\theta}{2} \right) x_0}{\alpha \sin \frac{(2k+1)\theta}{2} + \beta \cos \frac{(2k+1)\theta}{2}}.$$

C.3 Colisões Consecutivas Antiparalelas Completas

Determinamos analiticamente as posições e as velocidades das partículas nas CCAPC em duas situações: na primeira, impomos que as partículas sempre colidam ao mesmo tempo nas paredes; e na segunda, uma das partículas colide com a parede antes que a outra. Em seguida, explicitamos as condições de validade das equações que preveem o número de CCAPC (Eqs. (4.35), (4.36), (4.40) e (4.41)).

C.3.1 As partículas chegam às paredes simultaneamente

Suponha as partículas **1** e **2** partindo de uma mesma posição inicial x_0 com velocidades $v_1^{(a)} < 0$ e $v_2^{(a)} > 0$ em direção às extremidades 0 e 1 do intervalo $[0, 1]$, nas quais são refletidas. Então, as partículas colidem entre si com velocidades $-v_1^{(a)} > 0$ e $-v_2^{(a)} < 0$.

As velocidades pós-colisão $v_1^{(d)}$ e $v_2^{(d)}$ são

$$v_1^{(d)} = \frac{(1 - \gamma)(-v_1^{(a)}) + 2\gamma(-v_2^{(a)})}{1 + \gamma}, \quad (\text{C.12a})$$

$$v_2^{(d)} = \frac{2(-v_1^{(a)}) + (\gamma - 1)(-v_2^{(a)})}{1 + \gamma}. \quad (\text{C.12b})$$

Definindo que $v_1^{(d)} = v_1^{(a)}$ e $v_2^{(d)} = v_2^{(a)}$, de quaisquer das Eqs. (C.12), obtemos

$$\frac{-v_1^{(a)}}{v_2^{(a)}} = \gamma. \quad (\text{C.13})$$

Pelas funções horárias das posições das partículas partindo de x_0 ,

$$x_1 = x_0 + v_1^{(a)}t_1, \quad x_2 = x_0 + v_2^{(a)}t_2,$$

determinamos o tempo para cada uma das partículas chegar às paredes,

$$t_1 = -\frac{x_0}{v_1^{(a)}}, \quad t_2 = \frac{1 - x_0}{v_2^{(a)}}.$$

A imposição da chegada simultânea até as paredes, $t_1 = t_2$, fornece a posição inicial x_0 em termos das velocidades iniciais,

$$x_0 = \frac{v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}. \quad (\text{C.14})$$

Substituindo a Eq. (C.13) em (C.14), expressamos a posição inicial em termos da razão das massas γ ou de θ ,

$$x_0 = \frac{\gamma}{\gamma + 1}, \quad \text{ou} \quad x_0 = \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

em que $\gamma = \text{tg}^2 \frac{\theta}{2}$, isto é, as massas das partículas determinam o valor de x_0 para que ambas as partículas sejam refletidas simultaneamente nas paredes.

C.3.2 As partículas não chegam às paredes simultaneamente

Considere duas partículas partindo de uma mesma posição y_0 com velocidades $v_1^{(a)} < 0$ e $v_2^{(a)} > 0$, movendo-se para as extremidades do intervalo $[0, 1]$. As duas partículas colidem nas paredes, mas não necessariamente ao mesmo tempo. Então, imediatamente antes da colisão entre as partículas, as velocidades são $-v_1^{(a)} > 0$ e $-v_2^{(a)} < 0$. As velocidades após a colisão são dadas pelas Eqs. (C.12), mas aqui assumimos que $v_1^{(d)} \neq v_1^{(a)}$ e $v_2^{(d)} \neq v_2^{(a)}$.

As funções horárias das posições das partículas partindo de y_0 são

$$x_1 = y_0 + v_1^{(a)} t_1, \quad x_2 = y_0 + v_2^{(a)} t_2,$$

das quais obtemos o tempo necessário para cada partícula chegar nas paredes,

$$t_1 = -\frac{y_0}{v_1^{(a)}}, \quad t_2 = \frac{1 - y_0}{v_2^{(a)}}.$$

Conforme a nossa suposição, as partículas não chegam ao mesmo tempo nas paredes, $t_1 < t_2$ ou $t_1 > t_2$. As duas possibilidades resultam na mesma equação para y_1 . Por isso, explicitemos os cálculos apenas para $t_1 < t_2$: neste caso, a **1** chega em 0 antes que a **2** chegue na extremidade $L = 1$. Então, a posição de **2** quando a **1** chegar em 0 é

$$x_2(t_1) = y_0 + v_2^{(a)} t_1 \Rightarrow x_2(t_1) = \left(1 - \frac{v_2^{(a)}}{v_1^{(a)}}\right) y_0.$$

Como a **1** parte de 0 e a **2** parte de $x_2(t_1)$ ainda em direção a parede em $L = 1$, escrevemos as novas funções horárias das posições,

$$x'_1 = -v_1^{(a)} t'_1, \quad x'_2 = x_2(t_1) + v_2^{(a)} t'_2.$$

Aqui há duas possibilidades: a **1** colide com a **2** antes que a **2** chegue em $L = 1$; a **2** chega em $L = 1$ antes que a **1** a alcance. Tomemos a segunda possibilidade para que se tenha uma colisão AP completa. Assim sendo, o tempo para que a **2** chegue em $L = 1$ é

$$t'_2 = \frac{1 - x_2(t_1)}{v_2^{(a)}},$$

e a posição da **1** neste instante é

$$x'_1(t_2) = -\frac{v_1^{(a)}}{v_2^{(a)}} (1 - x_2(t_1)).$$

Agora, ambas as partículas foram refletidas nas paredes, cujas posições são,

$$x''_1 = x'_1(t_2) - v_1^{(a)} t''_1, \quad x''_2 = 1 - v_2^{(a)} t''_2.$$

Para $x''_1 = x''_2$, obtemos o tempo de encontro t_e das duas partículas,

$$t_e = \frac{1 - x'_1(t_2)}{v_2^{(a)} - v_1^{(a)}},$$

resultando na posição de colisão $y_1 = x''(t_e)$,

$$y_1 = \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0, \quad (\text{C.15})$$

Por raciocínio análogo, a Eq. (C.15) é obtida para $t_1 > t_2$.

Após a colisão p-p, as partículas partem de y_1 com velocidades $v_1^{(d)}$ e $v_2^{(d)}$. Para que a próxima colisão p-p seja AP completa, $v_1^{(d)} < 0$ e $v_2^{(d)} > 0$. Em seguida, ambas colidem nas paredes, de modo que, imediatamente antes da nova colisão p-p, as velocidades sejam $-v_1^{(d)} > 0$ e $-v_2^{(d)} < 0$, que é a situação semelhante à inicial. Por conseguinte, o procedimento para se determinar a posição de colisão y_2 é o mesmo usado para se encontrar y_1 . Em vista disso, $y_2 = \frac{2v_1^{(d)}}{v_1^{(d)} - v_2^{(d)}} - y_1$. Como $v_1^{(d)} - v_2^{(d)} = v_1^{(a)} - v_2^{(a)}$ e substituindo y_1 em termos de y_0 , obtemos

$$y_2 = \frac{2(v_1^{(d)} - v_1^{(a)})}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} + y_0. \quad (\text{C.16})$$

As velocidades após a colisão em y_2 é

$$v_1'^{(d)} = \frac{(1 - \gamma)(-v_1^{(d)}) + 2\gamma(-v_2^{(d)})}{1 + \gamma}, \quad (\text{C.17a})$$

$$v_2'^{(d)} = \frac{2(-v_1^{(d)}) + (\gamma - 1)(-v_2^{(d)})}{1 + \gamma}. \quad (\text{C.17b})$$

Substituindo as Eqs. (C.12) nas Eqs. (C.17), obtemos $v_1'^{(d)} = v_1^{(a)}$ e $v_2'^{(d)} = v_2^{(a)}$, recuperando as velocidades que iniciaram as colisões AP completas, mas em uma posição $y_2 \neq y_0$. Logo, enquanto ocorrer colisões AP completas, as velocidades possíveis são $\pm v_1^{(a)}$, $\pm v_2^{(a)}$, $\pm v_1^{(d)}$ e $\pm v_2^{(d)}$. Dessa forma, aplicando iterativamente a regra representada pela Eq. (C.15) nas posições de colisão AP completas subsequentes, obtemos

$$\begin{aligned} y_3 &= \frac{2(2v_1^{(a)} - v_1^{(d)})}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0, & y_4 &= \frac{4(v_1^{(d)} - v_1^{(a)})}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} + y_0 \\ y_5 &= \frac{2(3v_1^{(a)} - 2v_1^{(d)})}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0, & y_6 &= \frac{6(v_1^{(d)} - v_1^{(a)})}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} + y_0, \\ y_7 &= \frac{2(4v_1^{(a)} - 3v_1^{(d)})}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0, & y_8 &= \frac{8(v_1^{(d)} - v_1^{(a)})}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} + y_0, \quad \text{etc.} \end{aligned}$$

Identificamos que as posições de colisão de índices pares podem ser expressos como

$$y_{2k} = \frac{2k(v_1^{(d)} - v_1^{(a)})}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} + y_0, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{C.18})$$

Substituindo a Eq. (C.12a) na Eq. (C.18), obtemos

$$y_{2k} = -\frac{4k(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})} + y_0, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{C.19})$$

Esta equação, juntamente com a aplicação da regra representada pela Eq. (C.15),

$$y_{2k+1} = \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_{2k}, \quad (\text{C.20})$$

permite expressar analiticamente as posições de índices ímpares,

$$y_{2k+1} = \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} + \frac{4k(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})} - y_0, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{C.21})$$

Se definirmos

$$\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) = -\frac{2(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})},$$

as Eqs. (C.19) e (C.21) são melhor denotadas por

$$y_{2k} = 2k\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) + y_0, \quad (\text{C.22a})$$

$$y_{2k+1} = \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 2k\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) - y_0. \quad (\text{C.22b})$$

C.3.3 Condições de validade para as equações de previsão do número de CCAPC

As equações

$$2k_m = \left\lfloor \min \left\{ \frac{1 - y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})}, \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) \right\} \right\rfloor, \quad (\text{C.23})$$

$$2k_m = \left\lfloor \min \left\{ -\frac{y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})}, \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) \right\} \right\rfloor, \quad (\text{C.24})$$

permitem estimar o número de CCAPC através das condições iniciais de posição y_0 e de velocidades $v_1^{(a)}$ e $v_2^{(a)}$ e da razão das massas. No entanto, uma investigação detalhada delas nos possibilita determinar o número exato de CCAPC e saber, de antemão, a expressão analítica para $2k_m$.

O caso $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$

Para $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$, a velocidade do centro de massa é positiva, então $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} > 0$; logo

$$\frac{|v_1^{(a)}|}{v_2^{(a)}} < \gamma. \quad (\text{C.25})$$

Por outro lado, como na Eq. (C.23) se compara dois valores, tomando-se o menor deles, há duas desigualdades,

$$\frac{1 - y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \leq \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right),$$

cada uma se referindo a uma das respostas possíveis. Dessas desigualdades, obtemos $v_2^{(a)} \leq |v_1^{(a)}|$.

▷ Para $v_2^{(a)} < |v_1^{(a)}|$, temos $1 < \frac{|v_1^{(a)}|}{v_2^{(a)}}$; comparando com (C.25), concluímos que $\gamma > 1$. Como esta condição corresponde a

$$2k_m = \left\lfloor \frac{1 - y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \right\rfloor,$$

isso significa que

$$2k_m \lesssim \frac{1 - y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})}. \quad (\text{C.26})$$

Substituindo (C.26) nas Eqs. (C.22), obtemos

$$y_{2k_m} \lesssim 1, \quad (\text{C.27a})$$

$$y_{2k_m+1} \gtrsim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 1. \quad (\text{C.27b})$$

A posição y_{2k_m} é a última posição de colisão par das CCAPC. Para se mostrar isto, considere a posição y_{2k_m+2} escrito em termos de y_{2k_m} ,

$$y_{2k_m+2} = y_{2k_m} - \frac{4(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})},$$

e aplicando a desigualdade (C.27a),

$$y_{2k_m+2} \lesssim 1 - \frac{4(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})}.$$

Agora, se $y_{2k_m+2} \leq 1$, então

$$-\frac{4(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})} \leq 0.$$

Como $v_2^{(a)} < |v_1^{(a)}|$, obtemos $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} \leq 0$; mas isto contradiz o fato de ser positiva a velocidade do centro de massa. Portanto, $y_{2k_m+2} > 1$. Assim, y_{2k_m} é a última posição par das CCAPC.

A posição y_{2k_m+1} é a última posição de colisão das CCAPC. Para se ver isto, devemos mostrar que $0 < y_{2k_m+1} < 1$. Mostremos primeiro que $0 < y_{2k_m+1}$.

A relação $v_2^{(a)} < |v_1^{(a)}|$ implica em $v_1^{(a)} < v_2^{(a)}$, em que $v_1^{(a)} < 0$ e $v_2^{(a)} > 0$; logo, $0 < \frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}$, a qual, por sua vez, equivale a $0 < \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 1$. Portanto, da (C.27b), $0 < y_{2k_m+1}$.

Agora mostremos que $y_{2k_m+1} < 1$. Isto significa que devemos ter $0 < \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 1 \lesssim y_{2k_m+1} < 1$. De fato, se não fosse, teríamos duas alternativas:

$$0 < \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 1 \lesssim 1 \leq y_{2k_m+1}, \quad (\text{C.28})$$

ou

$$0 < 1 \leq \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 1 \lesssim y_{2k_m+1}. \quad (\text{C.29})$$

Usando $y_{2k_m+1} = \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_{2k_m}$ na alternativa (C.28), obtemos $1 \leq \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_{2k_m}$, da qual decorre que $y_{2k_m} \leq \frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}$, contradizendo a condição (4.28); logo, a (C.28) é falsa. A alternativa (C.29) dá $1 \leq \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 1$, a qual implica $v_2^{(a)} < 0$, mostrando a falsidade de (C.29). Podemos concluir que y_{2k_m+1} é a última colisão das CCAPC.

$\triangleright v_2^{(a)} > |v_1^{(a)}|$; logo, $\frac{|v_1^{(a)}|}{v_2^{(a)}} < 1$, mas a sua comparação com (C.25) resulta em duas desigualdades, $\gamma \lesssim 1$. Para uma resposta inequívoca, lembremos que CCAPC são favorecidas para $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} \approx 0$. Sendo positiva a velocidade do centro de massa e $v_2^{(a)} > |v_1^{(a)}|$, a velocidade $v_2^{(a)}$ deve ser reduzida a fim de satisfazer $v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)} \gtrsim 0$; isto só é possível se $\gamma < 1$.

Esta situação corresponde a

$$2k_m = \left\lfloor \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) \right\rfloor,$$

ou seja,

$$2k_m \lesssim \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right). \quad (\text{C.30})$$

Substituindo (C.30) nas Eqs. (C.22), obtemos

$$y_{2k_m} \lesssim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}, \quad (\text{C.31a})$$

$$y_{2k_m+1} \gtrsim 0. \quad (\text{C.31b})$$

A posição y_{2k_m} não é a última posição de colisão par das CCAPC. Considerando a posição par subsequente, y_{2k_m+2} , a Eq. (C.22a) e a condição (C.31a), obtemos

$$y_{2k_m+2} \lesssim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} + 2\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}). \quad (\text{C.32})$$

Como y_{2k} é uma função crescente, $0 < y_{2k_m+2}$, pois $0 < y_{2k_m} < y_{2k_m+2}$. Além disso, devemos ter $y_{2k_m+2} < 1$. Vamos supor, ao invés, que $y_{2k_m+2} \geq 1$ para todo $\gamma < 1$ na condição (C.32). Isto resulta em $0 < \frac{|v_1^{(a)}|}{v_2^{(a)}} \leq \frac{3\gamma-1}{3-\gamma}$; ora, esta desigualdade não vale para todo $\gamma < 1$. Por exemplo, se $\gamma = \frac{1}{4}$, temos $0 < \frac{|v_1^{(a)}|}{v_2^{(a)}} \leq -\frac{1}{11}$, que é uma contradição. Portanto, $y_{2k_m+2} < 1$.

A posição y_{2k_m+1} é a última posição de colisão ímpar das CCAPC. Para se ver isto, devemos mostrar que $y_{2k_m+3} < 0 < y_{2k_m+1}$. A posição y_{2k_m+3} em termos de y_{2k_m+2} é $y_{2k_m+3} = \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_{2k_m+2}$; em seguida, aplicamos a condição (C.32), resultando em $y_{2k_m+3} \gtrsim -2\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$. Assumindo que $y_{2k_m+3} \geq 0$, há duas alternativas,

$$y_{2k_m+3} \gtrsim \frac{4(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})} \geq 0, \quad (\text{C.33})$$

ou

$$y_{2k_m+3} \geq 0 \gtrsim \frac{4(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})}. \quad (\text{C.34})$$

De maneira imediata, a alternativa (C.33) nos dá a contradição $\frac{1}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} \geq 0$, pois $v_1^{(a)} < 0$ e $v_2^{(a)} > 0$. Pela alternativa (C.34), $0 \leq y_{2k_m+3}$; sendo $y_{2k_m+3} = \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_{2k_m+2}$, obtemos $y_{2k_m+2} \leq \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}$, contradizendo a condição (C.31a), pois $y_{2k_m} < y_{2k_m+2}$. Portanto, $y_{2k_m+3} < 0$ e, assim, y_{2k_m+1} é a última colisão ímpar das CCAPC.

O caso $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < 0$

Para este caso, é desnecessário repetir a análise feita para $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) > 0$, pois basta usarmos a relação de equivalência explicada nas páginas 56-58. Então, mostremos isto. Considere a função $\mathcal{F}(\gamma', v_1'^{(a)}, v_2'^{(a)}) > 0$. Definindo $v_1'^{(a)} = -v_2^{(a)}$, $v_2'^{(a)} = -v_1^{(a)}$ e $\gamma' = \gamma^{-1}$, $\mathcal{F}(\gamma', v_1'^{(a)}, v_2'^{(a)})$ fica

$$\mathcal{F}(\gamma', v_1'^{(a)}, v_2'^{(a)}) = \frac{2(v_1^{(a)} + \gamma v_2^{(a)})}{(1 + \gamma)(v_1^{(a)} - v_2^{(a)})},$$

ou seja, $\mathcal{F}(\gamma', v_1'^{(a)}, v_2'^{(a)}) = -\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$. Logo, $\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)}) < 0$.

Fazendo a substituição $v_1'^{(a)} = -v_2^{(a)}$, $v_2'^{(a)} = -v_1^{(a)}$, $\gamma' = \gamma^{-1}$, $\mathcal{F}(\gamma', v_1'^{(a)}, v_2'^{(a)}) = -\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})$ e $y'_0 = 1 - y_0$ nas equações

$$2k_m = \left\lfloor \frac{1 - y'_0}{\mathcal{F}(\gamma', v_1'^{(a)}, v_2'^{(a)})} \right\rfloor, \quad v_2'^{(a)} < |v_1'^{(a)}|, \quad \gamma' > 1,$$

$$y'_{2k_m} \lesssim 1, \quad y'_{2k_m+1} \gtrsim \frac{2v_1'^{(a)}}{v_1'^{(a)} - v_2'^{(a)}} - 1,$$

obtemos, respectivamente,

$$2k_m = \left\lfloor -\frac{y_0}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \right\rfloor, \quad |v_1^{(a)}| < v_2^{(a)}, \quad \gamma < 1.$$

$$y_{2k_m} \gtrsim 0, \quad y_{2k_m+1} \lesssim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}}.$$

O mesmo procedimento aplicado nas equações

$$2k_m = \left\lfloor \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma', v_1'^{(a)}, v_2'^{(a)})} \left(\frac{2v_1'^{(a)}}{v_1'^{(a)} - v_2'^{(a)}} - y'_0 \right) \right\rfloor, \quad v_2'^{(a)} > |v_1'^{(a)}|, \quad \gamma' < 1,$$

$$y'_{2k_m} \lesssim \frac{2v_1'^{(a)}}{v_1'^{(a)} - v_2'^{(a)}}, \quad y'_{2k_m+1} \gtrsim 0,$$

resulta, respectivamente, em

$$2k_m = \left\lfloor \frac{1}{\mathcal{F}(\gamma, v_1^{(a)}, v_2^{(a)})} \left(\frac{v_1^{(a)} + v_2^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - y_0 \right) \right\rfloor, \quad |v_1^{(a)}| > v_2^{(a)}, \quad \gamma > 1,$$

$$y_{2k_m} \gtrsim \frac{2v_1^{(a)}}{v_1^{(a)} - v_2^{(a)}} - 1, \quad y_{2k_m+1} \lesssim 1.$$

Portanto, as Eqs. (4.40) e (4.41), suas condições de validade e as posições y_{2k_m} e y_{2k_m+1} são obtidas das Eqs. (4.35) e (4.36), de suas condições de validade e das posições y_{2k_m} e y_{2k_m+1} pela troca adequada das velocidades, da posição inicial e da razão das massas.

Colisões Consecutivas Paralelas em sentidos opostos

Uma outra possibilidade de colisões consecutivas entre as partículas é a paralela em sentidos opostos: para a primeira colisão paralela com velocidades positivas (negativas), a segunda colisão paralela será com velocidades negativas (positivas). Mostraremos que *não é possível se ter três colisões paralelas consecutivas alternadas, sendo a terceira necessariamente uma colisão AP incompleta*. Para isto, usamos excepcionalmente velocidades não normalizadas e a versão matricial das equações por apresentar maior simplicidade que a abordagem via velocidades normalizadas. Mostramos, para ambas as situações, a impossibilidade de ocorrer três colisões paralelas consecutivas em sentidos opostos. Isto se deve à irreversibilidade do sentido do movimento da partícula de massa relativamente maior e mais rápida quando colide com uma partícula com massa relativamente menor e mais lenta. Para que se cumprisse a Etapa 4, a razão das massas γ deveria mudar durante o processo, o que é impossível em nosso sistema.

D.1 Primeira colisão paralela a velocidades positivas

Sejam v_1 e v_2 velocidades das partículas tais que $0 < v_2 < v_1$. Considere também a Fig. D.1 e as respectivas etapas. Assim:

Etapa 0: $v_1^{(0)} = -v_1$ e $v_2^{(0)} = v_2$.

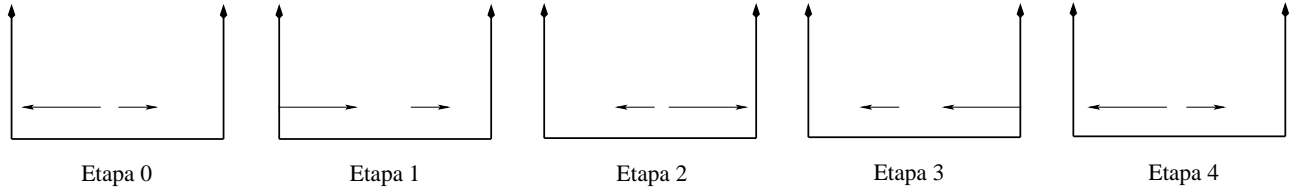


Figura D.1: Etapas de uma sequência de colisões p-p em sentidos opostos. A flecha esquerda representa a velocidade da partícula **1** e a flecha direita, a velocidade da **2**. A Etapa 4 é possível apenas se $v_2^{(4)} < 0$.

Etapa 1: A partícula 1 colide com a parede:

$$\begin{bmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}.$$

Etapa 2: Supondo que a partícula **1** seja mais rápida que a **2**, as duas partículas colidem entre si:

$$\begin{bmatrix} v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \end{bmatrix} = \frac{1}{1+\gamma} \begin{bmatrix} 1-\gamma & 2\gamma \\ 2 & \gamma-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{bmatrix} = \frac{1}{1+\gamma} \begin{bmatrix} 1-\gamma & 2\gamma \\ 2 & \gamma-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}.$$

Para que $v_1^{(2)} < 0$, devemos ter

$$(1-\gamma)v_1 + 2\gamma v_2 < 0,$$

satisfeita desde que

$$\frac{v_1}{v_2} > \frac{2\gamma}{\gamma-1}.$$

Isto significa que $v_1^{(2)} < 0$ é satisfeita também para $\gamma \gg 1$. Além disso, considerando valores grandes para γ , garante-se que $v_2^{(1)} > 0$.

Como $v_1 > v_2$, após a colisão se tem $|v_1^{(2)}| < |v_2^{(2)}|$, ou seja, $-v_1^{(2)} < v_2^{(2)}$; assim, segue-se de

$$-(1-\gamma)v_1 - 2\gamma v_2 < 2v_1 + (\gamma-1)v_2,$$

que

$$\frac{v_1}{v_2} < \frac{3\gamma-1}{\gamma-3},$$

condição esta que a **1** seja mais lenta que a **2** após a colisão, com $\gamma > 3$ (e não apenas $\gamma > 1$).

Etapla 3: A partícula **2** colide com a parede:

$$\begin{bmatrix} v_1^{(3)} \\ v_2^{(3)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \end{bmatrix} = \frac{1}{1+\gamma} \begin{bmatrix} 1-\gamma & 2\gamma \\ -2 & 1-\gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix},$$

em que $|v_1^{(3)}| < |v_2^{(3)}|$.

Etapla 4: As partículas **1** e **2** colidem entre si novamente:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} v_1^{(4)} \\ v_2^{(4)} \end{bmatrix} &= \frac{1}{1+\gamma} \begin{bmatrix} 1-\gamma & 2\gamma \\ 2 & \gamma-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(3)} \\ v_2^{(3)} \end{bmatrix} = \\ &= \frac{1}{(1+\gamma)^2} \begin{bmatrix} 1-6\gamma+\gamma^2 & 4\gamma(1-\gamma) \\ 4(1-\gamma) & 6\gamma-\gamma^2-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Após a colisão, a partícula **1** fica mais rápida e continua no mesmo sentido, ou seja, $v_1^{(4)} < 0$. Mostraremos agora que não é possível se ter $v_2^{(4)} > 0$.

Supondo $v_2^{(4)} > 0$, temos

$$4(1-\gamma)\frac{v_1}{v_2} > -(6\gamma-\gamma^2-1),$$

em que $4(1-\gamma) < 0$, pois constatamos que $\gamma > 1$. Logo,

$$4(\gamma-1)\frac{v_1}{v_2} < 6\gamma-\gamma^2-1 \Rightarrow \frac{v_1}{v_2} < \frac{6\gamma-\gamma^2-1}{4(\gamma-1)}.$$

Mas $1 < \frac{v_1}{v_2}$; assim $1 < \frac{6\gamma-\gamma^2-1}{4(\gamma-1)}$, cuja solução é $-1 < \gamma < 3$. Isto contradiz o resultado $\gamma > 3$. Portanto, $v_2^{(4)} < 0$.

D.2 Primeira colisão paralela a velocidades negativas

Sejam v_1 e v_2 velocidades das partículas tais que $0 < v_1 < v_2$. Considere também a Fig. D.2 e as respectivas etapas. Assim:

Etapla 0: $v_1^{(0)} = -v_1$ e $v_2^{(0)} = v_2$.

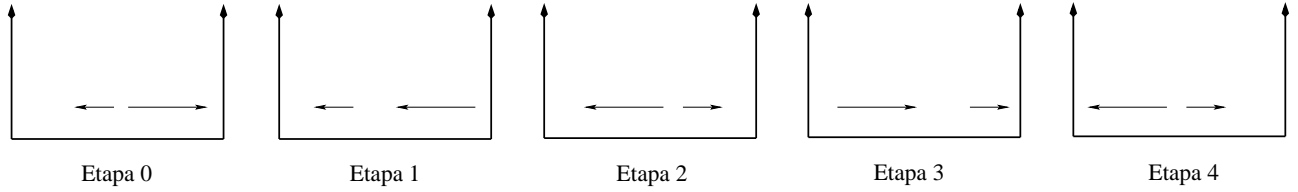


Figura D.2: Etapas de uma sequência de colisões p-p em sentidos opostos. A flecha esquerda representa a velocidade da partícula **1** e a flecha direita, a velocidade da **2**. A Etapa 4 é possível apenas $v_1^{(4)} > 0$.

Etapa 1: A partícula **2** colide com a parede:

$$\begin{bmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -v_1 \\ -v_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}.$$

Etapa 2: Supondo que a partícula **2** seja mais rápida que a **1**, as duas partículas colidem entre si:

$$\begin{bmatrix} v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \end{bmatrix} = \frac{1}{1+\gamma} \begin{bmatrix} 1-\gamma & 2\gamma \\ 2 & \gamma-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{bmatrix} = -\frac{1}{1+\gamma} \begin{bmatrix} 1-\gamma & 2\gamma \\ 2 & \gamma-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}.$$

Para que $v_2^{(2)} > 0$, devemos ter

$$-2v_1 - (\gamma - 1)v_2 > 0,$$

que é satisfeito desde que

$$\frac{v_2}{v_1} > \frac{2}{1-\gamma},$$

em que $\gamma < 1$, ou ainda, $\gamma \ll 1$. Note também que $|v_1^{(2)}| > |v_2^{(2)}|$, ou seja, $-v_1^{(2)} > v_2^{(2)}$; assim,

$$(1-\gamma)v_1 + 2\gamma v_2 > -2v_1 - (\gamma-1)v_2,$$

contanto que

$$\frac{v_2}{v_1} < \frac{3-\gamma}{1-3\gamma},$$

em que $\gamma < \frac{1}{3}$, condição esta que garante à partícula **2** ser mais lenta que a **1** após a colisão.

Etapa 3: A partícula **1** colide com a parede:

$$\begin{bmatrix} v_1^{(3)} \\ v_2^{(3)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \end{bmatrix} = \frac{1}{1+\gamma} \begin{bmatrix} 1-\gamma & 2\gamma \\ -2 & 1-\gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix},$$

em que $0 < v_2^{(3)} < v_1^{(3)}$.

Etapla 4: As partículas **1** e **2** colidem entre si novamente:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} v_1^{(4)} \\ v_2^{(4)} \end{bmatrix} &= \frac{1}{1+\gamma} \begin{bmatrix} 1-\gamma & 2\gamma \\ 2 & \gamma-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(3)} \\ v_2^{(3)} \end{bmatrix} = \\ &= \frac{1}{(1+\gamma)^2} \begin{bmatrix} 1-6\gamma+\gamma^2 & 4\gamma(1-\gamma) \\ 4(1-\gamma) & 6\gamma-\gamma^2-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Como imediatamente antes a partícula **2** é mais lenta que a **1**, com $v_2^{(3)} > 0$, imediatamente depois a partícula **2** fica mais rápida e com $v_2^{(4)} > 0$.

Agora, supondo que $v_1^{(4)} < 0$, temos

$$4\gamma(1-\gamma)\frac{v_2}{v_1} > 6\gamma-\gamma^2-1,$$

em que $4\gamma(1-\gamma) > 0$, pois constatamos que $\gamma < 1$. Logo,

$$\frac{v_2}{v_1} < \frac{6\gamma-\gamma^2-1}{4\gamma(1-\gamma)}.$$

Mas $1 < \frac{v_2}{v_1}$, então $1 < \frac{6\gamma-\gamma^2-1}{4\gamma(1-\gamma)}$, cuja solução é $\gamma < -1$ ou $\gamma > 3$, contradizendo a condição $0 < \gamma < \frac{1}{3}$ anteriormente obtida. Portanto, $v_1^{(4)} > 0$.

Prova da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$ para alguns valores de γ

Fornecemos uma prova da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$ correspondente aos valores de $\gamma = 2$, $\gamma = 4$ e $\gamma = 150$ por meio dos polinômios de Chebyshev de primeiro tipo [82]. Esta prova se baseia na demonstração da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$ para $\gamma = \frac{1}{2}$ apresentada por Michael Hardy em [83]. É claro que esta prova pode ser aplicada para outras razões de massas eventualmente encontradas nesta dissertação.

E.1 Polinômios de Chebyshev de primeiro tipo

O polinômio de Chebyshev $T_n(x)$ de primeiro tipo é um polinômio em $x \in [-1, 1]$ de grau n , com um $n \geq 0$ inteiro, dado por [82]

$$T_n(x) = \cos n\theta, \quad \text{quando } x = \cos \theta. \quad (\text{E.1})$$

Os polinômios $T_n(x)$ podem ser expressos como uma soma de potências de x [84],

$$T_n(x) = n \sum_{k=0}^n (-2)^k \frac{(n+k-1)!}{(n-k)(2k)!} (1-x)^k, \quad (\text{E.2})$$

a qual possui importância central para a nossa demonstração da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$.

Desejamos mostrar para certos valores de γ que $\frac{\theta}{\pi}$ é irracional através da prova por Redução ao Absurdo, ou seja, assumimos inicialmente que $\frac{\theta}{\pi}$ é racional, a fim de se obter alguma contradição na demonstração.

E.2 Dedução da expressão para a prova da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$

Suponha que $\frac{\theta}{\pi}$ seja racional. Então, existe inteiros $m \geq 0$ e $n > 0$, primos entre si, tais que $\theta = \frac{m\pi}{n}$. Desse modo, $\cos n\theta = (-1)^m$ e, pela Eq. (E.1),

$$T_n(x) = (-1)^m. \quad (\text{E.3})$$

Agora, considere razões de massas γ racionais; então $\cos \theta = \frac{1-\gamma}{1+\gamma}$ é racional. Sendo $x = \cos \theta$, podemos escrever

$$1 - x = \frac{r}{s}, \quad (\text{E.4})$$

com inteiros r e $s \neq 0$. Substituindo as Eqs. (E.3) e (E.4) na Eq. (E.2),

$$n \sum_{k=0}^n (-2)^k \frac{(n+k-1)!}{(n-k)!(2k)!} \left(\frac{r}{s}\right)^k = (-1)^m. \quad (\text{E.5})$$

Multiplicando ambos os lados por s^n , explicitando os termos $k=0$ e $k=n$ e distribuindo os termos ns^n nos termos do lado esquerdo, obtemos

$$s^n \left[1 + n \sum_{k=1}^{n-1} c_k (2rs^{-1})^k \right] + (-1)^n 2^{n-1} r^n = (-1)^m s^n, \quad (\text{E.6})$$

em que $c_k = (-1)^k \frac{(n+k-1)!}{(n-k)!(2k)!}$. Lembrando que m e n são coprimos:

- se m for par, então n é ímpar; assim, pela Eq. (E.6), temos

$$s^n n \sum_{k=1}^{n-1} (2rs^{-1})^k c_k = 2^{n-1} r^n. \quad (\text{E.7})$$

- se m for ímpar, então n pode ser par ou ímpar; desse modo, pela Eq. (E.6), temos

$$s^n \left[1 + n \sum_{k=1}^{n-1} (2^{k-1} r^k s^{-k}) c_k \right] = 2^{n-2} r^n. \quad (\text{E.8})$$

No entanto, precisamos apenas da Eq. (E.8) pois, sendo m par, a racionalidade presumida para $\theta = \frac{m\pi}{n}$ vale também para um ângulo $\theta' = \frac{\theta}{m}$, no qual teríamos $m' = 1$ e n ímpares.

Podemos aplicar agora os valores particulares de γ citados anteriormente na Eq. (E.8).

E.2.1 $\gamma = 2$

Para $\gamma = 2$, $\cos \theta = -\frac{1}{3}$ e, conseqüentemente, $1 - x = \frac{4}{3}$. Logo, $r = 4$ e $s = 3$ e a Eq. (E.8) fica

$$3^n \left[1 + n \sum_{k=1}^{n-1} (2^{k-1} 3^{-k}) c_k \right] = 2^{n-2}, \quad (\text{E.9})$$

ou seja, uma potência de 2 é um múltiplo de 3, contrariando a unicidade da decomposição em fatores primos. Portanto, $\frac{\theta}{\pi}$ é irracional.

E.2.2 $\gamma = 4$

Para $\gamma = 4$, $\cos \theta = -\frac{3}{5}$ e, conseqüentemente, $1 - x = \frac{8}{5}$. Logo, $r = 8$ e $s = 5$ e a Eq. (E.8) fica

$$5^n \left[1 + n \sum_{k=1}^{n-1} (2^{k-2} 5^{-k}) c_k \right] = 2^{4n-2}, \quad (\text{E.10})$$

ou seja, uma potência de 2 é um múltiplo de 5, contrariando a unicidade da decomposição em fatores primos. Portanto, $\frac{\theta}{\pi}$ é irracional.

E.2.3 $\gamma = 150$

Para $\gamma = 150$, $\cos \theta = -\frac{149}{151}$ e, conseqüentemente, $1 - x = \frac{300}{151}$. Logo, $r = 300$ e $s = 151$ e a Eq. (E.8) fica

$$151^n \left[1 + n \sum_{k=1}^{n-1} (2^{k-1} 300^k 151^{-k}) c_k \right] = 2^{n-2} 300^n, \quad (\text{E.11})$$

ou seja, $2^{n-2} 300^n$ é múltiplo do número primo 151, contrariando a unicidade da decomposição em fatores primos. Portanto, $\frac{\theta}{\pi}$ também é irracional.

As demonstrações da irracionalidade de $\frac{\theta}{\pi}$ para as razões de massas $\gamma = 2$, $\gamma = 4$ e $\gamma = 150$ implicam também na irracionalidade de um $\frac{\theta}{\pi}$ associado a cada uma das razões de massas $\gamma = \frac{1}{2}$, $\gamma = \frac{1}{4}$ e $\gamma = \frac{1}{150}$. Para se ver isto, considere $\cos \theta = \frac{1-\gamma}{1+\gamma}$ e $\cos \theta' = \frac{1-\gamma'}{1+\gamma'}$. Definindo $\gamma' = \gamma^{-1}$, expressemos $\cos \theta$ em termos de γ' . Isto nos dá $\cos \theta' = -\cos \theta$; para que $\theta \in (0, \pi)$ e $\theta' \in (0, \pi)$, a solução da equação trigonométrica deve ser $\theta' = \pi - \theta$. Como a soma de um racional com um irracional é irracional [85], temos que $\frac{\theta'}{\pi} = 1 - \frac{\theta}{\pi}$ é irracional, se $\frac{\theta}{\pi}$ for irracional.

Referências Bibliográficas

- [1] C. C. Laranjeiras e J. R. N. Chiappin. A heurística de Boltzmann e a emergência do programa mecânico estatístico. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **28**, 3, 297–312 (2006).
- [2] H. M. Nussenzveig. *Curso de Física Básica*, volume 2 (Editora Edgar Blücher Ltda., 2002), 4^a edição.
- [3] S. B. Volchan. A probabilidade na Mecânica Estatística Clássica. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **20**, 130–141 (1963).
- [4] H. Poincaré. *Les méthodes nouvelles de la mécanique celeste*, volume 1-3 (Gauthier-Villars, 1893).
- [5] H. Poincaré. Sur les courbes définies par les équations différentielles (III). *Journal de mathématiques pures et appliquées* **1**, 4, 167–244 (1885).
- [6] N. Fiedler-Ferrara e C. P. C. do Prado. *Caos - Uma Introdução* (Editora Edgar Blücher Ltda., 1994).
- [7] T. Shinbrot, C. Grebogi, J. Wisdom e J. A. Yorke. Chaos in a double pendulum. *American Journal of Physics* **60**, 6, 491–499 (1992).
- [8] E. W. Lorenz. Deterministic nonperiodic flow. *Journal of the Atmospheric Sciences* **28**, 3, 313–318 (2006).
- [9] R. Shone. *An Introduction to Economic Dynamics* (Cambridge University Press, 2001).
- [10] E. E. Peters. *Chaos and Order in the Capital Markets: A New View of Cycles, Prices, and Market Volatility* (John Wiley & Sons, Inc., 1996), 2^a edição.

- [11] C. Jeffries. *Mathematical Modeling in Ecology: A Work book for Students*. 3 (Birhäuser, 1989).
- [12] T. Jackson e A. Radunskaya, editores. *Applications of Dynamical Systems in Biology and Medicine*, volume 79 (Springer-Verlag, 2015).
- [13] M. Iannelli e A. Pugliese. *An Introduction to Mathematical Population Dynamics: Along the trail of Volterra and Lotka*, volume 79 (John Wiley & Sons, Inc., 2014).
- [14] S. K. Scott. *Chemical Chaos* (Oxford University Press, 1993).
- [15] S. Banerjee, M. Mitra e L. Rondoni, editores. *Applications of Chaos and Nonlinear Dynamics in Engineering*, volume 1-3 (Springer-Verlag, 2011).
- [16] G. B. Birkhoff. Proof of the ergodic theorem. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **17**, 12, 656–660 (1931).
- [17] C. R. de Oliveira. Ergodic hypothesis in Classical Statistical Mechanics. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **29**, 2, 189–201 (2007).
- [18] J. von Neumann. Proof of the quasi-ergodic hypothesis. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **18**, 1, 70–82 (1932).
- [19] Y. G. Sinai. Dynamical systems with elastic reflections. *Russian Mathematical Surveys* **4**, 137–191 (1970).
- [20] P. J. Richens e M. V. Berry. Pseudointegrable systems in classical and Quantum Mechanics. *Physica D* **2**, 3, 495–512 (1981).
- [21] A. Kaplan, M. Andersen, N. Friedman e N. Davidson. *Chaotic Dynamics and Transport in Classical and Quantum Systems*, volume 182 de *NATO Science Series*, capítulo Atomic-Optics Billiards, páginas 239–267 (Springer-Verlag, 2005).
- [22] G. Casati, C. Mejía-Monasterio e T. Prosen. Magnetically induced thermal rectification. *Physical Review Letters* **98**, 104302 (2007).
- [23] R. P. Taylor, R. Newbury, A. S. Sachrajda, Y. Feng, P. T. Coleridge, C. Dettmann, N. Zhu, H. G. A. Delage, P. J. Kelly e Z. Wasilewski. Self-Similar magnetoresistance of a semiconductor Sinai billiard. *Physical Review Letters* **78**, 10, 1952–1955 (1997).
- [24] Y. G. Sinai. On the foundations of the ergodic hypothesis for a dynamical system of statistical mechanics. *Soviet Mathematics Doklady* **4**, 1818–1822 (1963).

- [25] J. L. Rouet, F. Blasco e M. R. Feix. The one-dimensional Boltzmann gas: the ergodic hypothesis and the phase portrait of small systems. *Jornal of Statistical Physics* **71**, 1/2, 209–224 (1993).
- [26] M. Hasegawa. Broken ergodic motion of two hard particles in a one-dimensional box. *Physics Letters A* **242**, 19–24 (1998).
- [27] G. Casati e J. Ford. Computer study of ergodicity and mixing in a two-particle, hard point gas system. *Jornal of Computational Physics* **20**, 97–109 (1976).
- [28] R. Artuso, G. Casati e I. Guarneri. Numerical study on ergodic properties of triangular billiards. *Physical Review E* **55**, 6, 6384–6390 (1997).
- [29] A. Hobson. Ergodic properties of a particle moving elastically inside a polygon. *Journal of Mathematical Physics* **16**, 11, 2210–2214 (1975).
- [30] A. N. Zemlyakov e A. B. Katok. Topological transitivity of billiards in polygons. *Mathematical notes of the Academy of Sciences of the USSR* **18**, 2, 760–764 (1975).
- [31] E. Gutkin. Billiards in polygons. *Physica D* **19**, 3, 311–333 (1986).
- [32] E. Gutkin. Billiards in polygons: Survey of recent results. *Journal of Statistical Physics* **83**, 1/2, 7–26 (1996).
- [33] B. Cipra, R. M. Hanson e A. Kolan. Periodic trajectories in right-triangle billiards. *Physical Review E* **52**, 2, 2066–2071 (1995).
- [34] M. Boshernitzan, G. Galperin, T. Krüger e S. Troubetzkoy. Periodic billiard orbits are dense in rational polygons. *Transactions of the American Mathematical Society* **350**, 3523–3535 (1998).
- [35] G. Galperin e D. Zvonkine. Periodic billiard trajectories in right triangles and right-angled tetrahedra. *Regular and Chaotic Dynamics* **8**, 1, 29–44 (2003).
- [36] J. Wang, G. Casati e T. Prosen. Nonergodicity and localization of invariant measure for two colliding masses. *Physical Review E* **89**, 0429181–0429184 (2014).
- [37] Y. B. Vorobets. Ergodicity of billiards in polygons: explicit examples. *Russian Mathematical Surveys* **51**, 4, 756–757 (1996).
- [38] S. T. Thornton e J. B. Marion. *Dinâmica Clássica de Partículas e Sistemas* (Cengage Learning, 2011), 5ª edição.
- [39] N. Lemos. *Mecânica Analítica* (Editora Livraria da Física, 2004), 1ª edição.

- [40] K. R. Symon. *Mecânica* (Editora Campus Ltda., 1982), 1ª edição.
- [41] C. Lanczos. *The Variational Principles of Mechanics*. Número 4 em Mathematical Expositions (University of Toronto Press, 1952).
- [42] L. H. A. Monteiro. *Sistemas Dinâmicos* (Editora Livraria da Física, 2006), 2ª edição.
- [43] E. Ott. *Chaos in Dynamical Systems* (Cambridge University Press, 1993).
- [44] M. Hénon. A two-dimensional mapping with a strange attractor. *Communications in Mathematical Physics* **50**, 69–77 (1976).
- [45] N. Moharana, M. Speetjens, R. Trieling e H. Clercx. Three-dimensional Lagrangian transport phenomena in unsteady laminar flows driven by a rotating sphere. *Physics of Fluids* 25(9):093602-1/23 · August 2013 **25**, 9, 093602–1/23 (2013).
- [46] D. G. Dimitriu et al.. Simple experimental methods to control chaos in a double plasma machine. *Acta Physica Slovaca* **54**, 2, 89–96 (2004).
- [47] J. L. Lebowitz e O. Penrose. Modern ergodic theory. *Physics Today* **February**, 23–29 (1973).
- [48] W. Greiner, L. Neise e H. Stöcker. *Thermodynamics and Statistical Mechanics* (Springer-Verlag, 1995).
- [49] S. R. A. Salinas. *Introdução à Física Estatística* (EDUSP, 2013), 2ª edição.
- [50] M. A. M. de Aguiar. *Tópicos de Mecânica Clássica* (Editora Livraria da Física, 2011), 1ª edição.
- [51] W. F. Wreszinski. *Mecânica Clássica Moderna* (EDUSP, 1997).
- [52] C. I. Doering e A. O. Lopes. *Equações Diferenciais Ordinárias* (IMPA, 2005).
- [53] W. E. Boyce e R. C. DiPrima. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno* (Livros Técnicos e Científicos Editora, 1999), 6ª edição.
- [54] J. Berkovitz, R. Frigg e F. Kronz. The ergodic hierarchy, randomness and Hamiltonian chaos. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **37**, 661–691 (2006).
- [55] R. Frigg, J. Berkovitz e F. Kronz. *The Ergodic Hierarchy* (The Stanford Encyclopedia of Philosophy, <http://plato.stanford.edu/entries/ergodic-hierarchy/>, 2014).

- [56] L. Barreira. *Ergodic Theory, Hyperbolic Dynamics and Dimension Theory* (Springer-Verlag, 2012).
- [57] G. Morandi, F. Napoli e E. Ercolessi. *Statistical Mechanics: An Intermediate Course* (World Scientific Publishing Company, 1995).
- [58] P. Castiglione, M. Falcioni, A. Lesne e A. Vulpiani. *Chaos and Coarse Graining in Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, 2008).
- [59] S. Tabachnikov. On the dual billiard problem. *Advances in Mathematics* **115**, 221–249 (1995).
- [60] M. V. Deryabin e L. D. Pustyl’nikov. Nonequilibrium gas and generalized billiards. *Journal of Statistical Physics* **126**, 1, 117–132 (2007).
- [61] H.-J. Stöckmann. *Quantum Chaos: An Introduction* (Cambridge University Press, 1999).
- [62] M. W. Beims, C. Machein e J. M. Rost. Origin of chaos in soft interactions and signatures of nonergodicity. *Physical Review E* **76**, 056203 (2007).
- [63] L. A. Toporowicz e M. W. Beims. Correlation effects of two interacting particles in a circular billiard. *Physica A* **371**, 5–9 (2006).
- [64] H. A. Oliveira, C. Manchein e M. W. Beims. Soft wall effects on interacting particles in billiards. *Physical Review E* **78**, 046208 (2008).
- [65] N. Nakazono, T. Kato e K. Nakamura. Quantum Mechanics of two hard disks with a circle billiard. *Progress of Theoretical Physics Supplement* , 150, 165–175 (2003).
- [66] E. P. S. Xavier, M. C. Santos, L. G. G. V. D. da Silva, M. G. E. da Luz e M. W. Beims. Quantum chaos for two interacting particles confined to a circular billiard. *Physica A* **342**, 377 (2004).
- [67] R. Markarian. Bilhares. A Hipótese Ergódica de Boltzmann. *Matemática Universitária* , 29, 45–74 (2000).
- [68] L. Bunimovich. Dynamical billiards. *Scholarpedia* **2**, 8, 1813 (2007). doi: [10.4249/scholarpedia.1813](https://doi.org/10.4249/scholarpedia.1813).
- [69] G. M. Zaslavsky. *The Physics of Chaos* (Imperial College Press, 2007), 2ª edição.
- [70] S. Kerckhoff, H. Masur e J. Smillie. Ergodicity of billiard flows and quadratic differentials. *Annals of Mathematics* **124**, 293–311 (1986).

- [71] S. Kerckhoff, H. Masur e J. Smillie. A rational billiard flow is uniquely ergodic in almost every direction. *Bulletin of the American Mathematical Society* **13**, 2, 141–142 (1985).
- [72] B. Hasselblatt e A. Katok. *A First Course in Dynamics: with a panorama of recent developments* (Cambridge University Press, 2003).
- [73] F. E. P. Hirzebruch e M. Kreck. On the concept of genus in Topology and Complex Analysis. *Notices of the American Mathematical Society* **56**, 6, 713 – 719 (2009).
- [74] P. Walters. *An Introduction to Ergodic Theory* (Springer-Verlag, 1982).
- [75] G. Manfredi, J.-L. Rouet e R. Dufour. On some analogies concerning the N-body problem, quantum billiards and the refraction of a light beam. *European Journal of Physics* **14**, 5, 206–210 (1993).
- [76] H. M. Nussenzveig. *Curso de Física Básica*, volume 1 (Editora Edgar Blücher Ltda., 2002), 4ª edição.
- [77] S. Hassani. *Mathematical Physics: a modern introduction to its foundations* (Springer-Verlag, 1999).
- [78] E. L. Lima. *Álgebra Linear* (IMPA, 1998), 3ª edição.
- [79] L. Kuipers e H. Niederreiter. *Uniform Distribution os Sequences* (John Wiley & Sons, Inc., 1974).
- [80] H. H. Domingues e G. Iezzi. *Álgebra Moderna* (Atual Editora, 2000), 3 edição.
- [81] G. Iezzi. *Fundamentos de Matemática Elementar*, volume 3 (Atual Editora., 2004), 8ª edição.
- [82] J. C. Mason e D. C. Handscomb. *Chebyshev Polynomials* (Chapman & Hall/CRC, 2003).
- [83] M. Hardy. URL <http://math.stackexchange.com/questions/398687/how-do-i-prove-that-frac1-pi-arccos1-3-is-irrational?lq=1> (2013).
- [84] Chebyshev polynomials. URL https://en.wikipedia.org/wiki/Chebyshev_polynomials.
- [85] I. Niven. *Numbers: Rational and Irrational* (Random House, 1961), 1ª edição.